前 言

最优化理论与方法讨论的是为找出对象问题的最优解决策略而采取的模型化及其方法．其过程是先将待解决问题用最优化形式描述为在给定的约束条件下找出使某个目标函数达到最大（小）解，然后再采用数学上严密的算法来求解．这一领域被认为是运筹学的一个重要的组成部分．

所谓问题解决方法，除了运筹学外，人们还提出了人工智能、专家系统、系统理论、模糊集合、神经网络和遗传算法等典型方法，并使它们实用化．这些方法各具特征，承担解决问题某个方面的任务，但难以替代数学规划（最优化的核心部分）的作用．这是因为把要解决的问题描述成最优化问题后，没有其他方法能像数学规划那样深刻解析对象问题，并给出精确解．

我们不仅从数学观点对这些最优化方法进行理论研究，还强调了它们作为实用工具在现实中被广泛应用的事实．大多数有代表性的最优化算法已有方便实用的应用数学软件（优化工具箱）．但是，有效地利用这些成果是以有待解决的问题已经被模型化成最优化问题的形式为前提的．

尽管仅靠最优化的方法不能解决所有问题，但这些方法对解决最优化问题中可以模型化的部分是必不可少的，今后也会继续起到解决方法的核心作用．

最优化有自己独特严谨的理论结构体系，实用有效的算法，色彩斑斓的应用．最优化算法构造巧妙，注重计算过程和收敛性分析．

计算机科学的发展为最优化方法提供了强大的计算支撑，算法的易于实现既是最优化理论的逻辑演绎，同时也促进了理论的螺旋式发展．成熟的应用数学软件既成为应用迅猛发展的有力工具，也使得各种不同算法的成功比较得以完成．

本书是根据作者多年来的讲义修改补充写成的。主要读者对象为数学与应用数学、信息与计算科学等理科专业和管理工程、系统工程等专业本科生和理工科院校的工科研究生，以及从事运筹优化应用的工程技术人员、管理人员。全书共分七章，比较系统地介绍了线性规划、非线性规划、整数规划、多目标规划、动态规划、蒙特卡罗方法，还简单地介绍了应用数学软件 Matlab。期望通过本书的学习，能使读者较好地理解定量优化的思想，掌握一些基本而常用的优化方法，并能运用优化的观点和方法分析解决实践中经常遇到的一些典型的优化问题。本书第 3、4、5、6、7 章由高雷阜撰写，第 1、2 章由赵艳艳撰写，全书由高雷阜修改定稿。限于水平，书中疏漏难免，恳请读者批评指正。

高雷阜

2005 年 10 月

目 录

第1章 Matlab简介

Matlab的全称是Matrix Laboratory，由美国Math Works公司开发，它是一种集数值计算、符号运算、可视化建模和发展以及图形处理等多种功能于一体的图形化语言，主要包括两大内容：核心函数和工具箱．现将其基本功能和操作介绍如下．

1.1 变　量

Matlab中变量的命名规则：

(1) 变量名必须是不含空格的单个词；

(2) 变量名区分大小写；

(3) 变量名最多不超过19个字符；

(4) 变量名必须以字母开始，之后可以是任意字母、数字或下划线，变量名中不允许使用标点符号．

除了上述命名规则，Matlab还有几个特殊变量，见表1.1．

表1.1

特殊变量	取　值
ans	用于结果的缺省变量名
pi	圆周率
eps	计算机的最小数，当和1相加时就产生一个比1大的数
flops	浮点运算数
inf	无穷大
NaN	不定量
i，j	$i=j=\sqrt{-1}$
nargin	所用函数的输入变量数目
nargout	所用函数的输出变量数目
realmin	最小可用正实数
realmax	最大可用正实数

1.2 运算符及标点符号

运算符见表1.2．

表 1.2

运算	算术运算符号	数组运算符号	矩阵运算符号
加法	+	+	+
减法	-	-	-
乘法	*	.*	*
除法	/,\	./,.\	/,\

在 Matlab 中：

(1) Matlab 的每条命令后，若为逗号或无标点符号，则显示命令的结果；若命令后为分号，则禁止显示结果.

(2) “%”后的文字为注释语句.

(3) “/...”表示续行.

1.3 数　组

1.3.1 数组的创建

简单数组的创建见表 1.3.

表 1.3

常用命令	说　明
x=[1 2 3 4 5]	创建包含指定元素的行向量
x=m:n	创建从 m 开始，加 1 计数，到 n 结束的行向量
x=m:p:n	创建从 m 开始，加 p 计数，到 n 结束的行向量
x=linspace(m, n, p)	创建从 m 开始，到 n 结束，有 p 个元素的行向量
x=logspace(m, n, p)	创建从 10^m 开始，到 10^n 结束，有 n 个元素的对数分隔行向量

例 1.1
```
>> x=1: 2: 11
x =
    1    3    5    7    9    11
>> y=linspace(0, 1, 5)
y =
    0    0.2500    0.5000    0.7500    1.0000
>> z=logspace(0, 1, 5)
z=
    1.0000    1.7783    3.1623    5.6234    10.0000
```

1.3.2 数组元素的访问

(1) 访问一个元素：数组元素可以用下标访问，如 x(i)表示数组 x 的第 i 个元素.

(2) 访问一块元素：x=(a: b: c)表示访问数组 x 从第 a 个元素开始、以步长为 b、到第 c 个元素(但不超过 c)的元素.

例 1.2
```
>> m=x(3: 2: 6), n=x(6: -4: 1)
```

```
m =
    5     9
n =
   11     3
```

1.3.3 数组的方向

例1.2中的数组都是行向量，数组也可以是列向量.列向量的数组操作和运算与行向量是一样的，唯一的区别是结果以列的形式显示. 产生列向量有两种方法：直接产生和转置产生.

例1.3
```
>> c=[1; 2; 3], b=c'
c =
    1
    2
    3
b =
    1  2  3
```

1.3.4 向量函数

一般标量函数都可用于数组，此时函数作用于数组的每个元素.向量函数只有作用于向量才有意义，常用的向量函数见表1.4.向量函数也可作用于矩阵，此时运算结果为一个行向量，行向量的每个元素是函数作用于矩阵的相应列向量所得的结果.

表1.4

函 数	功 能	函 数	功 能
max	最大值	mean	平均值
min	最小值	median	中间值
sum	和	prod	乘积
length	长度	sort	从小到大排列

1.4 矩 阵

1.4.1 创建矩阵

(1) 直接输入创建矩阵.Matlab中不需要设置矩阵的类型与维数，它们由输入的格式和内容来唯一决定.

小矩阵和没有任何规律的矩阵可以通过直接输入元素的方法来创建，数组、矩阵的元素由中括号括起来，同一行元素由逗号或者空格分开，行与行之间由回车或者分号分开.

例1.4
```
>>[1, 2
   2, 3]
ans =
    1  2
```

```
    2  3
>> [1, 2; 3, 4]
ans =
    1  2
    3  4
```

这种方法工作量大且容易出错，因此 Matlab 提供了许多函数和方法可以方便快速地创建矩阵.

(2) 使用冒号创建矩阵.方法与创建数组类似.

例 1.5

```
>> a=[-pi: pi; 2: 8]
a =
   -3.1416   -2.1416   -1.1416   -0.1416   0.8584   1.8584   2.8584
    2.0000    3.0000    4.0000    5.0000   6.0000   7.0000   8.0000
```

(3) 使用函数创建矩阵(见表 1.5)

表 1.5

矩阵符号	说　明
zeros(i, j)	创建 i 行 j 列的全零矩阵
ones(i, j)	创建 i 行 j 列的全 1 矩阵
eye(i, j)	创建 i 行 j 列的对角线为 1 的矩阵
rand(i, j)	创建 i 行 j 列的(0, 1)均步随机矩阵
[]	返回一个空矩阵

1.4.2 矩阵的提取

(1) 通过使用冒号提取矩阵.

例 1.6

```
>> x=[1 2 3; 4 5 6; 7 8 9];
>> x(: , 1)
ans =
    1
    4
    7
```

(2) Matlab 提供了 diag, tril , triv 等函数，可以实现对矩阵的提取.现以 diag 为例.

例 1.7

```
>> x=(1: 3); A=diag(x)
A =
    1  0  0
    0  2  0
    0  0  3
>> x=diag(A)
x =
    1
    2
    3
```

```
>> A=diag(x, 1)
A =
    0  1  0  0
    0  0  2  0
    0  0  0  3
    0  0  0  0
>> x=diag(A, 1)
x =
    1
    2
    3
```

1.4.3 删除

(1) x(:, j)=[]将矩阵 x 的第 j 列删除;

(2) x(i, :)=[]将矩阵的第 i 行删除.

例 1.8

```
>> x=[1 2 3; 4 5 6; 7 8 9];
>> x(:, 1)=[]
x =
    2  3
    5  6
    8  9
```

1.4.4 矩阵函数

内容见表 1.6.

表 1.6

函 数	功 能	函 数	功 能
exmp	矩阵的指数	rank	矩阵的秩
logm	矩阵的对数	condeig	对应于特征值的条件数
cond	矩阵的条件数	norm	矩阵的范数
det	方阵的行列式值	null	矩阵的零空间

1.4.5 特征值和特征向量

(1) d=eig(A) 返回矩阵 A 的特征值 d ;

(2) [V, D]= eig(A) 返回两个矩阵 V 和 D, D 的主对角线由 A 的特征值组成, V 的列向量由 A 的特征向量组成.

例 1.9

```
>> A=magic(3);
>> [V, D]=eig(A)
V =
```

```
     -0.5774   -0.8131   -0.3416
     -0.5774    0.4714   -0.4714
     -0.5774    0.3416    0.8131
D =
    15.0000         0         0
          0    4.8990         0
          0         0   -4.8990
```

1.5 图形绘制

1.5.1 二维图形绘制

Matlab 作图是通过描点、连线实现的，故在画一个曲线图形之前，必须先取得该图形上的一系列的点的坐标，命令为

```
plot(x, y, s)
plot(x, y)
plot(x, y1, s1, x, y2, s2, ..., x, yn, sn)
```

其中，x，y 是向量，分别表示点集的横坐标和纵坐标，命令 plot(x, y, s)描绘该点集所表示的曲线，其线型由 s 确定：

y 黄色	. 点	- 实线
r 红色	o 圈	-- 虚线
g 绿色	+ 加号	: 点线
b 蓝色	s 正方形	-. 点划线

命令 plot(x, y1, s1, x, y2, s2, ..., x, yn, sn)将多条线画在一起，参数同 plot(x, y, s).

例 1.10 在[0, 2 * pi]中，用红线画 sin(x)，用绿圈画 cos(x).

```
>> x=linspace(0, 2 * pi, 30); y=sin(x); z=cos(x);
>> plot(x, y, 'r', x, z, 'go')
```

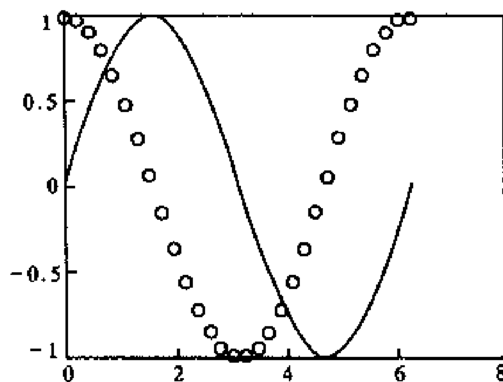


图 1.1

1.5.2 图形标注

(1) xlabel, ylabel, title 三个函数分别对 x 轴，y 轴以及全图进行标注，可以使图形变

得完整.

例 1.11 fplot('sin(x)./x', [-20 20 -0.4 1.2]);
title('Fplot of f(x)=sin(x)/x');
xlabel('x'), ylabel('f(x)')

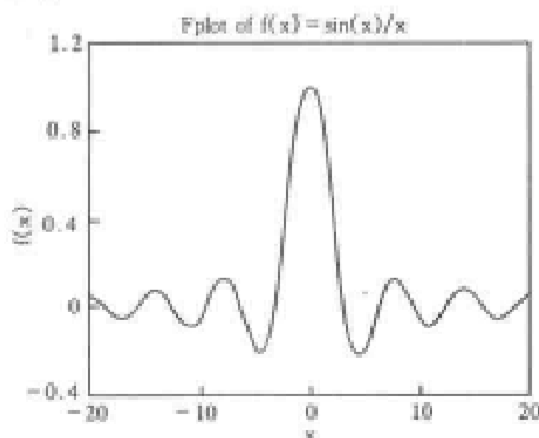


图 1.2

(2) 函数 gtext 可以将一个字符串放到图形中，位置由鼠标确定.

(3) grid on 可以在当前坐标轴上添加网格线.

例 1.12 plot(peaks(80));
gtext('a beautiful figure', 'fontsize', 16);
grid on

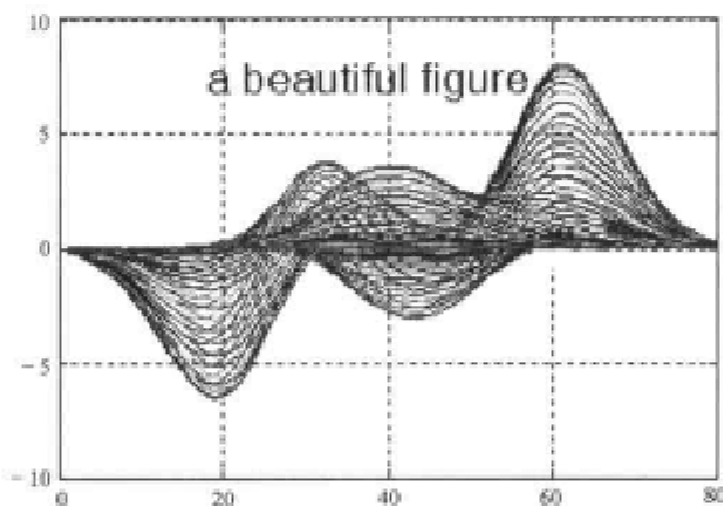


图 1.3

1.5.3 三维图形绘制

(1) plot3 函数可以用来绘制一个三维的曲线，它的格式类似于 plot，不过多了一个 z 方向的数据.

例 1.13 t=0: pi/50: 10 * pi;
plot3(sin(t), cos(t), t);

```
title('Helix');
xlabel('sin(t)');
ylabel('cos(t)');
zlabel('t');
axis('ij') % 加上这个指令，注意图的 y 轴及曲线方向改变了
```

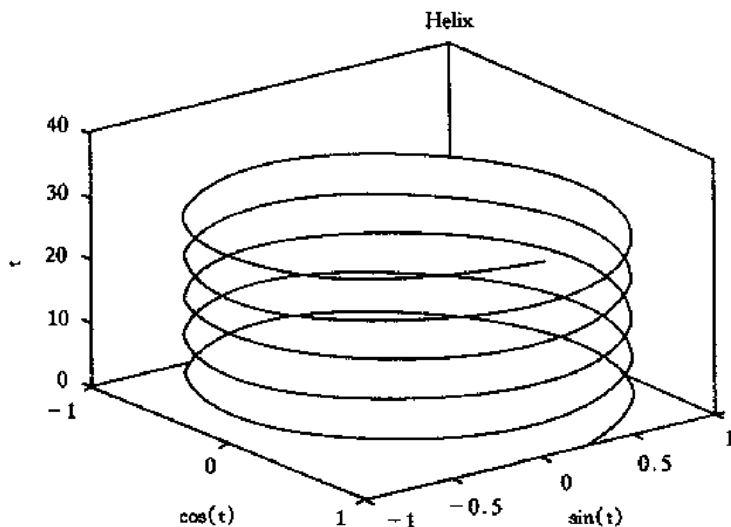


图 1.4

(2) mesh 也是三维空间立体绘图的基本命令，mesh 可画出立体网格图，其产生的图形都会依高度有不同颜色.

例 1.14 画出由函数 $Z=xe^{-(x^2+y^2)}$ 形成的立体网格图.

```
x = linspace(-1, 1, 25);
y = linspace(-1, 1, 25);
[xx, yy] = meshgrid(x, y);
zz = xx. * exp(-xx.^2 - yy.^2);
mesh(xx, yy, zz)
```

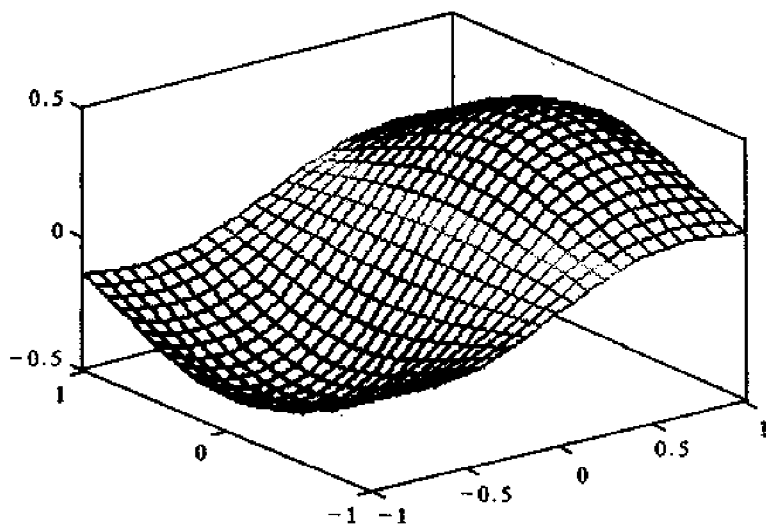


图 1.5

1.6 M 文件

Matlab 的内部函数是有限的，有时需要定义新函数，为此必须编写函数文件，函数文件是文件名后缀为 M 的文件，这类文件的第一行必须由 function 开始，格式为

function 因变量名 = 函数名(自变量名).

例 1.15 画出函数 $f(x)=\sqrt{(x-20)^2+100^2}+\sqrt{(x-120)^2+200^2}$的图形.

首先要编写函数文件，Matlab 中有一个新建文件选项，可建立新的 M 文件．在编辑环境下录入语句：

```
function yy = f2(x);
yy = sqrt((x - 20).^2 + 100^2) + sqrt((x - 120).^2 + 200^2);
```

保存，函数名与文件名相同都是 f2，然后执行语句：

```
x = 20: 120; y = f2(x);
plot(x, y)
xlabel('x'), ylabel('f2(x)')
```

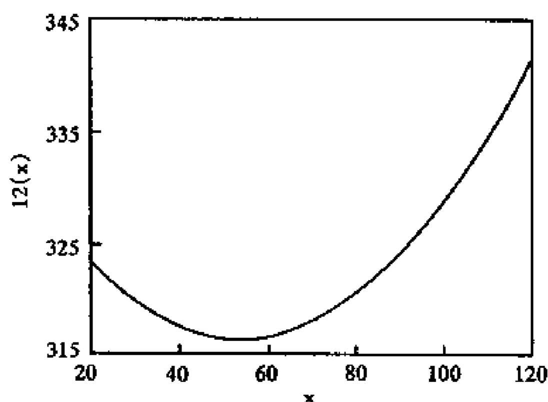


图 1.6

1.7 优化工具箱

工具箱是 Matlab 的关键部分，它是 Matlab 强大功能得以实现的载体和手段，也是对 Matlab 基本功能的重要扩充．其中，优化工具箱(optimization toolbox)涉及函数的最小化或最大化问题，即函数的极值问题．它的主要功能包括：

(1) 求无约束非线性最小化；

(2) 求有约束非线性最小化(包括目标获取问题、最小最大化问题和半无限最小化问题)；

(3) 线性规划和二次规划问题；

(4) 约束线性最小二乘法；

(5) 解非线性方程；

(6) 非线性最小二乘法和曲线拟合问题；

(7) 稀疏和结构化大尺度问题.

另外，还可以通过加入自己编写的 M 文件或者把优化工具箱同其他工具箱相结合来扩展优化工具箱的功能.

1.7.1 Matlab 求解优化问题的主要函数

内容见表 1.7.

表 1.7

类　型	模　型	基本函数名
一元函数极小	min F(x) s.t. x1<x<x2	x = fminbnd('F', x1, x2)
无约束极小	min F(x)	x = fminunc('F', x0) x = fminsearch('F', x0)
线性规划	$\min c^T x$ s.t. $Ax\leqslant b$	x = linprog(c, A, b)
二次规划	$\min \frac{1}{2}x^T Hx + c^T x$ s.t. $Ax\leqslant b$	x = quadprog(H, c, A, b)
约束极小 (非线性规划)	min F(x) s.t. $G(x)\leqslant 0$	x = fmincon('FG', x0)
达到目标问题	min r s.t. $F(x)-wr\leqslant goal$	x = fgoalattain('F', x, goal, w)
极小极大问题	$\min\limits_{x} \max\limits_{\{Fi(x)\}} \lvert Fi(x)\rvert$ s.t. $G(x)\leqslant 0$	x = fminimax('FG', x0)

1.7.2 优化函数的输入变量

使用优化函数或优化工具箱中其他优化函数时，输入变量见表 1.8.

表 1.8

变量	描　述	调用函数
f	线性规划的目标函数 f * X 或二次规划的目标函数 X' * H * X + f * X 中线性项的系数向量	linprog, quadprog
fun	非线性优化的目标函数. fun 必须为行命令对象或 M 文件、嵌入函数、MEX 文件的名称	fminbnd, fminsearch, fminunc, fmincon, lsqcurvefit, lsqnonlin, fgoalattain, fminimax
H	二次规划的目标函数 X' * H * X + f * X 中二次项的系数矩阵	quadprog
A, b	A 矩阵和 b 向量分别为线性不等式约束：AX≤b 中的系数矩阵和右端向量	linprog, quadprog, fgoalattain, fmincon, fminimax
Aeq, beq	Aeq 矩阵和 beq 向量分别为线性等式约束：Aeq·X = beq 中的系数矩阵和右端向量	linprog, quadprog, fgoalattain, fmincon, fminimax
vlb, vub	X 的下限和上限向量：vlb≤X≤vub	linprog, quadprog, fgoalattain, fmincon, fminimax, lsqcurvefit, lsqnonlin
x0	迭代初始点坐标	除 fminbnd 外所有优化函数
x1, x2	函数最小化的区间	fminbnd
options	优化选项参数结构，定义用于优化函数的参数	所有优化函数

1.7.3 优化函数的输出变量

内容见表 1.9.

表 1.9

变量	描　　述	调用函数
x	由优化函数求得的值.若 exitflag>0，则 x 为解；否则，x 不是最终解，它只是迭代停止时优化过程的值	所有优化函数
fval	解 x 处的目标函数值	linprog，quadprog，fgoalattain，fmincon，fminimax，lsqcurvefit，lsqnonlin，fminbnd
exitflag	描述退出条件：exitflag>0，表目标函数收敛于解 x 处；exitflag＝0，表已达到函数评价或迭代的最大次数；exitflag<0，表目标函数不收敛	
output	包含优化结果信息的输出结构. Iterations：迭代次数 Algorithm：所采用的算法 FuncCount：函数评价次数	所有优化函数

1.7.4 控制参数 options 的设置

options 中常用的几个参数的名称、含义、取值如下：

(1) Display：显示水平.取值为“off”时，不显示输出；取值为“iter”时，显示每次迭代的信息；取值为“final”时，显示最终结果.默认值为“final”.

(2) MaxFunEvals：允许进行函数评价的最大次数，取值为正整数.

(3) MaxIter：允许进行迭代的最大次数，取值为正整数.控制参数 options 可以通过函数 optimset 创建或修改. 命令的格式如下：

① options＝optimset('optimfun')，创建一个含有所有参数名，并与优化函数 optimfun 相关的默认值的选项结构 options.

② options = optimset('param1'，value1，'param2'，value2，...)，创建一个名称为 options的优化选项参数，其中指定的参数具有指定值，所有未指定的参数取默认值.

③ options = optimset(oldops，'param1'，value1，'param2'，value2，...)，创建名称为 oldops 的参数的拷贝，用指定的参数值修改 oldops 中相应的参数.例如

opts = optimset('Display'，'iter'，'TolFun'，1e－8).

创建了一个称为 opts 的优化选项结构，其中显示参数设为“iter”，TolFun 参数设为“1e－8”.

关于优化工具箱里各种函数的用法，将在以后的章节中详细介绍.

第2章 线性规划

线性规划是数学规划的一个重要分支. 它在理论和算法上都比较成熟，有着广泛的应用，不仅许多实际课题属于线性规划问题，而且运筹学其他分支中的一些问题也可以转化为线性规划来解决. 因此,线性规划在最优化学科中占有重要地位. 本章介绍如何应用线性规划的理论和方法解决线性系统的最优化问题.

2.1 线性规划模型

2.1.1 模型实例

例 2.1 农业生产计划安排问题 某村计划在 100 公顷土地上种植 A, B, C 三种农作物，可提供的劳力、粪肥和化肥等资源的数量，种植每公顷作物所需这三种资源的数量以及能获得的利润见表 2.1.

表 2.1

	用工	粪肥/吨	化肥/千克	利润/元
A	450	35	350	1500
B	600	25	400	1200
C	900	30	300	1800
可用资源	63000	3300	33000	

其中,一个劳动力干一天为 1 个工. 试确定三种农作物的种植面积，以使得总利润最大.

下面分析怎样建立数学模型.

设农作物 A, B, C 的种植面积分别为 x_1, x_2 和 x_3 公顷. 显然，总利润的表达式为

$$1500x_1 + 1200x_2 + 1800x_3. \tag{2.1.1}$$

确定种植面积时，资源限制有 4 种.

(1) 土地限制，总的种植面积为 100 公顷，即

$$x_1 + x_2 + x_3 = 100; \tag{2.1.2}$$

(2) 劳力限制，种植三种农作物用工不能超过允许值 63000 个工，即

$$450x_1 + 600x_2 + 900x_3 \leqslant 63000; \tag{2.1.3}$$

(3) 粪肥限制，即

$$35x_1 + 25x_2 + 30x_3 \leqslant 3300; \tag{2.1.4}$$

(4) 化肥限制，即

$$350x_1 + 400x_2 + 300x_3 \leqslant 33000. \tag{2.1.5}$$

$$x_1, x_2, x_3 \geqslant 0. \tag{2.1.6}$$

综上所述，例 2.1 就是在条件(2.1.2)～(2.1.6)的限制下，求最优解 x_1, x_2, x_3 使(2.1.1)最大. 因此，问题的数学模型写作

$$\begin{aligned}
\max\quad & 1500x_1 + 1200x_2 + 1800x_3,\\
\text{s.t.}\quad & x_1 + x_2 + x_3 = 100,\\
& 450x_1 + 600x_2 + 900x_3 \leqslant 63000,\\
& 35x_1 + 25x_2 + 30x_3 \leqslant 3300,\\
& 350x_1 + 400x_2 + 300x_3 \leqslant 33000,\\
& x_1, x_2, x_3 \geqslant 0.
\end{aligned}$$

其中，max 是 maximize 的简写，读作"极大化"，s.t.是 subject to 的简写，读作"受限制于"或"约束条件是". (2.1.1)称为目标函数，(2.1.2)～(2.1.6) 称为约束条件.

例 2.2　合理下料问题　某建筑工地需制作一批直径相同的钢筋套件，其规格及数量为：长度 3m 的共 90 根，长度 4m 的共 60 根. 已知用于下料的螺纹钢原料每根长 10m. 问应该如何下料才合理？试建立数学模型.

根据原材料长度及所需钢筋的长度要求，每根原料的下料方法有 3 种：方法 1，截成 3 根 3m 的钢筋，剩下残料 1m；方法 2，截成 2 根 3m，1 根 4m 的钢筋，无残料；方法 3，截成 2 根 4m 的钢筋，剩下残料 2m. 其余的方法明显不合理，可不予考虑.

为满足各种钢筋的数量要求，可取 x_i 原料螺纹钢按方法 $i(i=1,2,3)$下料，于是，可获得

3m 钢筋根数：　$3x_1+2x_2$，

4m 钢筋根数：　x_2+2x_3，

残料总长度(m)：　x_1+2x_3.

一般来说，显然在满足配套成 90 根 3m，60 根 4m 钢筋后，总会剩下部分长度为 3m 和 4m 的短钢筋，现分别设为 s_1 根和 s_2 根，即

$$s_1 = 3x_1 + 2x_2 - 90,$$
$$s_2 = x_2 + 2x_3 - 60.$$

最后，需要讨论的是，合理下料的评判标准为：使残料及配套后剩下的短钢筋的总长度最小. 设此总长度为 Z，则合理下料问题的数学模型为

$$\begin{aligned}
\min\quad & Z = x_1 + 2x_3 + 3s_1 + 4s_2,\\
\text{s.t.}\quad & 3x_1 + 2x_2 - s_1 = 90,\\
& x_2 + 2x_3 - s_2 = 60,\\
& x_1, x_2, x_3 \geqslant 0, s_1, s_2 \geqslant 0, \text{且 } x_i, s_j \in Z, i=1,2,3, j=1,2.
\end{aligned}$$

其中，min 是 minimize 的简写，读作"极小化".

例 2.1,2.2 中所建立的数学模型均为线性规划模型.

2.1.2　线性规划的特征

从例 2.1,2.2 可以看出线性规划(linear programming，简写为 LP)在本质上是一种特殊的约束条件下的最大(小)值问题，其数学模型由两大部分组成，即目标函数和约束条件. 其基本特征是：

(1) 目标函数是线性函数；

(2) 约束条件用线性等式或线性不等式表示.

为了便于讨论并寻找有效的解法，需要约定线性规划的标准形式(standard form). 在本书中，约定线性规划的标准形式为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n, \\
\text{s.t.} \quad & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\
& a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\
& \cdots\cdots\cdots \\
& a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m, \\
& x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,n.
\end{aligned}
$$

其中，$b_i \geqslant 0, i = 1,2,\cdots,m$，且不存在多余约束.

为讨论和叙述方便，常记 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$，称为决策向量；$\boldsymbol{c} = (c_1, c_2, \cdots, c_n)$，称为价格向量；$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_m)^{\mathrm{T}}$ 称为资源向量；$\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m \times n}$，即为约束方程组系数矩阵.

于是标准形式的线性规划可表示为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = \boldsymbol{cx}, \\
\text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \\
& \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0}.
\end{aligned}
$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是行满秩的，$\boldsymbol{b} \geqslant \boldsymbol{0}$.

也可记为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = \boldsymbol{cx}, \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^{n} x_j \boldsymbol{P}_j = \boldsymbol{b}, \\
& \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0}.
\end{aligned}
$$

其中，$\boldsymbol{P}_j = (a_{1j}, a_{2j}, \cdots, a_{mj})^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2, \cdots, \boldsymbol{P}_n)$.

2.1.3 标准化的方法

直接根据实际问题所建立的线性规划模型常常不是标准形式的，其资源约束条件和变量往往部分地或全部地不符合标准形式的要求，但是，总可以采用如下的办法将它化成标准形式.

(1) 若原问题是极大化问题，即

$$
\begin{aligned}
\max \quad & Z = \boldsymbol{cx}, \\
\text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in D.
\end{aligned}
$$

考虑新问题：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z' = -\boldsymbol{cx}, \\
\text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in D.
\end{aligned}
$$

容易证明，这两个问题具有完全相同的最优点(当然，最优值相差一个符号). 因此，只需求出 Z' 在同一约束下的极小点，就得到了原问题的极大点.

(2) 原问题的资源约束条件是不等式，即

① 存在某个 i，使

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \leqslant b_i,$$

则可引入一个非负变量x'_i，又称为松弛变量(slack variable)，用下面的两式替换原不等式约束：

$$\begin{cases} \sum a_{ij}x_j + x'_i = b_i, \\ x'_i \geqslant 0. \end{cases}$$

② 存在某个 i，使

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \geqslant b_i,$$

则可引入一个非负变量 x'_i，又称为剩余变量(surplus variable)，将不等式化为

$$\begin{cases} \sum a_{ij}x_j - x'_i = b_i, \\ x'_i \geqslant 0. \end{cases}$$

(3) 若某个变量没有正负要求，即

① x_j 是自由变量，没有符号限制，则可用两个非负变量之差替换为 x_j：

$$\begin{cases} x_j = x'_j - x''_j, \\ x'_j \geqslant 0, x''_j \geqslant 0. \end{cases}$$

②若 x_j 要求是非正变量，则可令

$$x_j = -x'_j,$$
$$x'_j \geqslant 0.$$

例 2.3 试将下列线性规划标准化.

①

$$\begin{aligned} \max \quad & Z = 2x_1 - 4x_2 + 5x_3, \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 - x_2 - x_3 = 5, \\ & 2x_1 - x_2 + 3x_3 \leqslant 3, \\ & -x_1 - x_2 + 4x_3 \geqslant 7, \\ & x_1, \ x_2, \ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

②

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = 4x_1 - x_2 - 7x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 - x_3 = 5, \\ & 3x_1 - x_2 + x_3 \leqslant 4, \\ & x_1, \ x_2 \geqslant 0, x_3 \text{ 自由}. \end{aligned}$$

解 ① 原问题的标准形式为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z' = -2x_1 + 4x_2 - 5x_3, \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 - x_2 - x_3 = 5, \\ & 2x_1 - x_2 + 3x_3 + x_4 = 3, \\ & -x_1 - x_2 + 4x_3 - x_5 = 7, \\ & x_1, \ x_2, \ x_3, \ x_4, x_5 \geqslant 0. \end{aligned}$$

② 令 $x_3 = x_4 - x_5$，原问题标准化为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = 4x_1 - x_2 - 7x_4 + 7x_5, \\
\text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 - x_4 + x_5 = 5, \\
& 3x_1 - x_2 + x_4 - x_5 + x_6 = 4, \\
& x_1,\ x_2,\ x_4,\ x_5,\ x_6 \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

2.1.4 线性规划问题的解

设有标准形式的线性规划

$$\min \quad Z = \boldsymbol{cx}, \tag{2.1.7}$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \tag{2.1.8}$$

$$\boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0} \tag{2.1.9}$$

定义 2.1 可行域(feasible region) 设集合

$$D = \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0}\},$$

即 D 是满足该线性规划的所有约束条件的点的集合，称之为该线性规划的可行域，而称可行域中的点为可行解(feasible solution)，或可行点.

定义 2.2 最优解(optimal solution) 设 $\boldsymbol{x}^*$ 是线性规划的一个可行解，如果对于任一个可行点 $x \in D$，都有

$$\boldsymbol{cx}^* \leqslant \boldsymbol{cx},$$

则称 $\boldsymbol{x}^*$ 是线性规划的一个最优解，而相应的目标函数值 $\boldsymbol{cx}^*$ 则称为最优值.

如果可行域 D 有界，可以证明，必有最优解；如果可行域 D 无界，则既可能存在最优解，也可能不存在最优解. 也就是说，虽然存在可行解，但对于任何一个可行解，总存在目标函数值比它更小的可行解，没有一个可行解满足最优解的定义.

显然，对于一个给定的线性规划问题，尤其是为解决实际问题而提出的线性规划问题，最重要的是要得到最优值.

由于已约定(2.1.8)中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是行满秩的 m 行 n 列的矩阵，$\boldsymbol{A}$ 中至少存在一个 m 阶的非奇异子矩阵.

定义 2.3 基向量(basic vector) 设矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是(2.1.8)中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个 m 阶非奇异子矩阵，则称 $\boldsymbol{B}$ 是线性规划问题(2.1.7)～(2.1.9)的一个基，称基的列向量为(这个基对应的)基向量，而称基向量对应的变量为基变量(basic variable).

若点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 满足约束方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，而且由基 $\boldsymbol{B}$ 所确定的非基变量在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 中的值全为零，则称 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是该线性规划的一个(由基 $\boldsymbol{B}$ 确定的)基本解(basic solution).

设 $\boldsymbol{B}$ 是基，将系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列作适当调整，得

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{N}).$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{N}$ 是非基向量构成的子矩阵. 相应的，记由基变量构成的 m 维向量为 $\boldsymbol{x}_B$，非基变量构成的 $n-m$ 维向量记为 $\boldsymbol{x}_N$，则有

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b},$$

$$(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{N})\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_B \\ \boldsymbol{x}_N \end{pmatrix} = \boldsymbol{b}.$$

所以

$$\boldsymbol{Bx}_B + \boldsymbol{Nx}_N = \boldsymbol{b}.$$

令 $\boldsymbol{x}_N = \boldsymbol{0}$，则向量 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix}$ 是基 $\boldsymbol{B}$ 所确定的唯一的基本解.

显然，基本解不一定是可行解，可行解也不一定是基本解．如果点 $\bar{x}$ 既是基本解，又是可行解，则称 $\bar{x}$ 是基本可行解，简称基可行解(basic feasible solution)，而与基可行解对应的基则称为可行基．如果一个基可行解是最优解，则称其对应的基是最优基．

例 2.4 设

$$A=(\boldsymbol{P}_1,\boldsymbol{P}_2,\cdots,\boldsymbol{P}_5)=\begin{pmatrix}1&1&0&2&3\\1&3&1&6&0\end{pmatrix},\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}6\\3\end{pmatrix}.$$

那么，$\begin{pmatrix}1&1\\1&3\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1&2\\1&6\end{pmatrix},\begin{pmatrix}2&3\\6&0\end{pmatrix}$ 等都是基，而 $\begin{pmatrix}1&2\\3&6\end{pmatrix}$ 不可逆，因而不是基．

现取基 $\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}0&3\\1&0\end{pmatrix}=(\boldsymbol{P}_3,\boldsymbol{P}_5)$，则 $x_B=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}0&3\\1&0\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}6\\3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\2\end{pmatrix}$，所以，$\bar{x}=(0,0,3,0,2)$是基本解．$\bar{x}$ 满足非负条件，所以又是可行解，因此 $\bar{x}$ 又是基可行解．

显然，任一个线性规划问题只有有限个基，因而只有有限个基本解，其基本可行解的个数也不超过 C_n^m 个．如果在基本可行解中，其基本变量对应的分量中存在零，则此基本可行解是退化(degenerate)的．如无特别说明，本书中所提到的基本可行解都是指非退化的．

2.2 线性规划的基本定理

2.2.1 凸集的概念

定义 2.4 **凸集**(convex set) 设集合 $S\in E^n$，$S\neq\varnothing$．如果任取 S 中的两个点 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$，以及区间[0,1]中任一个数 λ，都有

$$\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}\in S,$$

则称集合 S 是凸集．

从几何的角度看，$\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}$代表以 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$为端点的线段，其中 $0\leqslant\lambda\leqslant1$，因此，若一个集合是凸集，则表示以此集合中的任意两个点为端点的线段都完全落在此集合中．

例 2.5 集合 $H=\{x\mid p^{\mathrm{T}}x=\alpha\}$为凸集，其中，$p$ 为 n 维列向量，α 为实数．

因为对于任意两点 $x^{(1)},x^{(2)}\in H$ 及每个实数 $\lambda\in[0,1]$，都有

$$p^{\mathrm{T}}[\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}]=\lambda p^{\mathrm{T}}x^{(1)}+(1-\lambda)p^{\mathrm{T}}x^{(2)}=\alpha,$$

因此 $\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}\in H.$

根据定义 2.4 知 H 为凸集．

集合 $H=\{x\mid p^{\mathrm{T}}x=\alpha\}$称为 E^n 中的超平面(hyperplane)，故超平面为凸集．

例 2.6 集合 $H^-=\{x\mid p^{\mathrm{T}}x\leqslant\alpha\}$为凸集．

因为对于任意两点 $x^{(1)},x^{(2)}\in H^-$ 及每个实数 $\lambda\in[0,1]$，都有

$$p^{\mathrm{T}}[\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}]=\lambda p^{\mathrm{T}}x^{(1)}+(1-\lambda)p^{\mathrm{T}}\lambda x^{(2)}\leqslant\alpha,$$

所以 $\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}\in H^-$．

根据定义 2.4 知 H^-为凸集．

集合 $H^-=\{x\mid p^{\mathrm{T}}x\leqslant\alpha\}$称为半空间，故半空间为凸集．

运用定义 2.4，不难验证下列命题：

设 S_1 和 S_2 为 E^n 中两个凸集，β 是实数，则

(1)$\beta S_1=\{\beta x \mid x\in S_1\}$为凸集；

(2)$S_1\cap S_2$ 为凸集；

(3)$S_1+S_2=\{x^{(1)}+x^{(2)} \mid x^{(1)}\in S_1, x^{(2)}\in S_2\}$为凸集；

(4)$S_1-S_2=\{x^{(1)}-x^{(2)} \mid x^{(1)}\in S_1, x^{(2)}\in S_2\}$为凸集.

在一个凸集的点中，有些点处于特殊的地位，如线段的两个端点、三角形的三个顶点，称这些点为极点，下面给出极点的一般定义.

定义 2.5　极点(extreme point)　设集合 S 是凸集，点 x 是 S 中的点.如果任取 S 中的两个点 $x^{(1)}, x^{(2)}$，以及开区间(0,1)中任一个数 λ，都不可能有

$$x=\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)},$$

则称 x 是凸集 S 的一个极点.

容易理解，设若点 $x, x^{(1)}, x^{(2)}$ 均属于凸集 S，$0\leqslant\lambda\leqslant1$．那么，点 x 为凸集 S 的极点的充要条件是：如果等式

$$x=\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}$$

成立，则必有

$$x=x^{(1)}=x^{(2)}.$$

定义 2.6　设 $x^{(1)},\cdots,x^{(m)}$ 为 E^n 中的 m 个点，若存在 m 个数 λ_i 满足

$$x=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x^{(i)}, \lambda_i\geqslant0, \sum_{i=1}^{m}\lambda_i=1,$$

则称点 x 是点 $x^{(1)},\cdots,x^{(m)}$ 的一个凸组合.

可以证明，有界闭凸集中的任意点都可以表示为其极点的凸组合．但对于无界凸集，上述结论不成立，仅有部分点可用极点的凸组合表示．为讨论无界凸集，需引入极方向的概念.

定义 2.7　设集合 S 是 n 维欧氏空间 E^n 中的闭凸集，d 是 E^n 中的非零向量．如果对于 S 中的每个点 x，$\exists\delta>0, \forall\lambda\in(0,\delta)$，都有

$$x+\lambda d\in S,\quad \lambda\geqslant0,$$

则称向量 d 是凸集 S 的一个方向．如果 d_1, d_2 是 S 的方向，且

$$d_1\neq\alpha d_2,\quad \forall\alpha>0,$$

则 d_1, d_2 是两个不同的方向．进一步，如果 d 是凸集 S 的一个方向，且不能表示为 S 的另外两个不同的方向的正组合，则称 d 是 S 的一个极方向.

在图 2.1 中，S 是一个无界凸集，向量 d_1, d_2, d_3, d_4，都是 S 的不同的方向，且 d_1, d_2 是极方向，d_3, d_4 不是极方向．根据平行四边形法则，易得

$$\begin{cases} d_3=\lambda_1 d_1+\lambda_2 d_2, & \lambda_1>0, \lambda_2>0, \\ d_4=\alpha_1 d_1+\alpha_2 d_2, & \alpha_1>0, \alpha_2>0, \end{cases}$$

这与极方向的定义不符.

2.2.2　凸集分离定理

凸集的一个重要性质是分离定理．在最优化理论中，有些重要结论可用凸集分离定理来证明.

所谓集合的分离，是指对于两个集合 D_1 和 D_2，存在一个超平面 H，使 D_1 在 H 的一边，D_2 在 H 的另一边. 如果超平面的方程为 $p^{\mathrm{T}}x=\alpha$，那么对位于 H 某一边的点 x，必有 $p^{\mathrm{T}}x\geqslant\alpha$，而对位于 H 另一边的点 x，必有 $p^{\mathrm{T}}x\leqslant\alpha$.

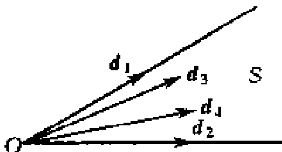


图 2.1

定义 2.8 设 D_1 和 D_2 是 E^n 中两个非空集合，$H=\{x\mid p^{\mathrm{T}}x=\alpha\}$ 为超平面. 如果对每个 $x\in D_1$，都有 $p^{\mathrm{T}}x\geqslant\alpha$；对于每个 $x\in D_2$，都有 $p^{\mathrm{T}}x\leqslant\alpha$(或情形恰好相反)，则称超平面 H 分离集合 D_1 和 D_2.

为给后面证明凸集分离定理作好准备，先给出定理 2.1,2.2.

定理 2.1 设集合 $D=\{x\mid Ax=b,x\geqslant 0\}$，其中 A 是行满秩的 m 行 n 列矩阵. 那么，集合 D 是闭凸集.

证明 首先，证明 D 是凸集. 任取 D 中的两个点 $x^{(1)},x^{(2)}$，以及 $\lambda\in[0,1]$，则有

$$
\begin{aligned}
&Ax^{(i)}=b,x^{(i)}\geqslant 0,i=1,2,\\
&A[\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}]=\lambda Ax^{(1)}+(1-\lambda)Ax^{(2)}\\
&\qquad=\lambda b+(1-\lambda)b\\
&\qquad=b,
\end{aligned}
$$

且 $$\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}\geqslant 0,$$

所以 $$\lambda x^{(1)}+(1-\lambda)x^{(2)}\in D.$$

由凸集的定义知，D 是凸集.

其次，可以证明 D 是闭集. 任取 D 中的收敛序列 $\{x^{(k)}\}$，设其极限点为 $\bar{x}$，则只需证明 $\bar{x}\in D$ 即可. 注意 D 是线性规划可行域，可等价地表述为

$$D=\left\{(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\mid\sum_{j=1}^{n}x_jP_j=b,x_j\geqslant 0\right\},$$

所以 $x^{(k)}$ 的每个分量 $x_j^{(k)},j=1,2,\cdots,n$ 都满足

$$\sum_{j=1}^{n}x_j^{(k)}P_j=b,x_j^{(k)}\geqslant 0,\quad j=1,2,\cdots,n.$$

因 $$x^{(k)}\to\bar{x},\quad 当\ k\to+\infty,$$

则 $$x_j^{(k)}\to\bar{x}_j,\quad j=1,2,\cdots,n,当\ k\to+\infty,$$

所以 $$\sum_{j=1}^{n}\bar{x}_jP_j=b,\bar{x}_j\geqslant 0,\quad j=1,2,\cdots,n,$$

表明 $\bar{x}\in D$，所以 D 是闭集.

综上，集合 D 是闭凸集.

定理 2.2 设 D 为 E^n 中的闭凸集，$y\notin D$，则存在唯一的点 $\bar{x}\in D$，使

$$\|y-\bar{x}\|=\inf_{x\in D}\|y-x\|.$$

证明 令

$$\inf_{x\in D}\|y-x\|=r>0,$$

由下确界的定义可知，存在序列 $\{x^{(k)}\}$，$x^{(k)}\in D$，使得 $\|y-x^{(k)}\|\to r$. 先证 $\{x^{(k)}\}$ 存在极限 $\bar{x}\in D$. 为此只需证明 $\{x^{(k)}\}$ 为 Cauchy 序列. 根据平行四边形定律(对角线的平方和等于一组邻边平方和的 2 倍)有

$$\| x^{(k)} - x^{(m)} \|^2 = 2\| x^{(k)} - y \|^2 + 2\| x^{(m)} - y \|^2 - 4\| \frac{x^{(k)} + x^{(m)}}{2} - y \|^2$$

$$\leqslant 2\| x^{(k)} - y \|^2 + 2\| x^{(m)} - y \|^2 - 4r^2.$$

由此可知，当 k 和 m 充分大时，$\| x^{(k)} - x^{(m)} \|$ 充分接近零．因此$\{x^{(k)}\}$为 Cauchy 序列，必存在极限 $\bar{x}$，又因为 D 为闭集，所以 $\bar{x} \in D$．

再证唯一性．设存在 $\hat{x} \in D$，使

$$\| y - \bar{x} \| = \| y - \hat{x} \| = r. \tag{2.2.1}$$

由于 D 为凸集，$\bar{x}$，$\hat{x} \in D$，因此$\frac{\bar{x}+\hat{x}}{2} \in D$，根据 Schwartz 不等式，得

$$\| y - \frac{\bar{x}+\hat{x}}{2} \| \leqslant \frac{1}{2}\| y - \bar{x} \| + \frac{1}{2}\| y - \hat{x} \| = r. \tag{2.2.2}$$

由 r 的定义及(2.2.2)可知

$$\| y - \frac{\bar{x}+\hat{x}}{2} \| = \frac{1}{2}\| y - \bar{x} \| + \frac{1}{2}\| y - \hat{x} \|, \tag{2.2.3}$$

则

$$y - \bar{x} = \lambda(y - \hat{x}),$$

因此

$$\| y - \bar{x} \| = |\lambda| \| y - \hat{x} \|. \tag{2.2.4}$$

考虑(2.2.1)，可知 $|\lambda| = 1$．若 $\lambda = -1$，则由(2.2.3)可推出 $y \in D$，与假设矛盾，所以 $\lambda \neq -1$，故 $\lambda = 1$．从而由(2.2.3)得到 $\bar{x} = \hat{x}$．

下面利用定理 2.2 证明点与凸集分离定理．为此先给出点与闭凸集分离的一种表达式．

设 D 为闭凸集，$y \notin D$，$H = \{x \mid p^{\mathrm{T}}x = \alpha\}$为超平面．根据定义 2.8，$H$ 分离点 y 与集合 D 意味着，若 $p^{\mathrm{T}}y > \alpha$，则 $p^{\mathrm{T}}x \leqslant \alpha$，$\forall x \in D$．令 $p^{\mathrm{T}}y - \alpha = \varepsilon$，于是 y 与 D 的分离可表示为

$$p^{\mathrm{T}}y \geqslant \varepsilon + p^{\mathrm{T}}x, \quad \forall x \in D.$$

定理 2.3　设 D 是 E^n 中的非空闭凸集，$y \notin D$，则存在非零向量 p 及数 $\varepsilon > 0$，使得对每个点 $x \in D$，成立 $p^{\mathrm{T}}y \geqslant \varepsilon + p^{\mathrm{T}}x$．

证明　由于 D 为闭凸集，$y \notin D$，则由定理 2.2 知，存在 $\bar{x} \in D$，使

$$\| y - \bar{x} \| = \inf_{x \in D} \| y - x \|. \tag{2.2.5}$$

令 $p = y - \bar{x}$，$\varepsilon = p^{\mathrm{T}}(y - \bar{x})$．下面证明，这样确定 p 和 ε 后，对每一点 $x \in D$，必然满足 $p^{\mathrm{T}}y \geqslant \varepsilon + p^{\mathrm{T}}x$，即 $p^{\mathrm{T}}(y - x) \geqslant \varepsilon$．

由于

$$\begin{aligned} p^{\mathrm{T}}(y - x) &= p^{\mathrm{T}}(y - \bar{x} + \bar{x} - x) \\ &= p^{\mathrm{T}}(y - \bar{x}) + p^{\mathrm{T}}(\bar{x} - x) \\ &= \varepsilon + (y - \bar{x})^{\mathrm{T}}(\bar{x} - x), \end{aligned} \tag{2.2.6}$$

因此，需证明$(y - \bar{x})^{\mathrm{T}}(\bar{x} - x) \geqslant 0$．

在 $\bar{x}$ 与 x 连线上取一点$\lambda x + (1-\lambda)\bar{x}$，则

$$\begin{aligned} \| y - \bar{x} \|^2 &\leqslant \| y - [\lambda x + (1-\lambda)\bar{x}] \|^2 = \| (y - \bar{x}) + \lambda(\bar{x} - x) \|^2 \\ &= \| y - \bar{x} \|^2 + \lambda^2 \| \bar{x} - x \|^2 + 2\lambda(y - \bar{x})^{\mathrm{T}}(\bar{x} - x), \end{aligned}$$

由此可知

$$(y-\bar{x})^{\mathrm{T}}(\bar{x}-x)+\frac{\lambda}{2}\|\bar{x}-x\|^{2}\geqslant 0. \qquad (2.2.7)$$

令 $\lambda\to 0$，则由(2.2.7)得

$$(y-\bar{x})^{\mathrm{T}}(\bar{x}-x)\geqslant 0. \qquad (2.2.8)$$

由(2.2.6)和(2.2.8)知 $\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(y-x)\geqslant\varepsilon$，即

$$\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\geqslant\varepsilon+\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\quad \forall x\in D.$$

定理 2.3 表明，当 D 为闭凸集，$y\notin D$ 时，y 与 D 是可分离的. 显然，当 D 为非空凸集，不一定为闭集，$y\notin clD$ 时，定理结论也是成立的. 这里 clD 表示集合 D 的闭包(由 D 的内点和边界点组成的集合). 进而可以证明，当 D 为非空凸集，$y\in\partial D$(∂D 表示 D 的边界)时，下列定理成立.

定理 2.4 设 D 是 E^n 中一个非空凸集，$\boldsymbol{y}\in\partial D$，则存在非零向量 $\boldsymbol{p}$，使得对每一点 $\boldsymbol{x}\in clD$，成立 $\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$.

证明 由于 $y\in\partial D$，则存在序列 $\{y^{(k)}\}$，$y^{(k)}\notin clD$ 时，使得 $y^{(k)}\to y$. 对于每一点 $y^{(k)}$，由定理 2.3 可知，存在单位向量 $p^{(k)}$，使得对每个点 $x\in clD$，成立 $\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(k)}>\boldsymbol{p}^{(k)\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$. 由于序列 $\{\boldsymbol{p}^{(k)}\}$ 有界，必存在收敛子序列 $\{\boldsymbol{p}^{(k_j)}\}$，其极限为单位向量 $\boldsymbol{p}$. 对于该子序列当然成立 $\boldsymbol{p}^{(k_j)\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(k_j)}>\boldsymbol{p}^{(k_j)\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，$\forall\, \boldsymbol{x}\in clD$. 固定 $\boldsymbol{x}\in clD$，令 $k_j\to\infty$，得到 $\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，$\forall\, \boldsymbol{x}\in clD$.

根据定理 2.3 和定理 2.4 可以得到下列推论.

推论 设 D 是 E^n 中的非空凸集，$\boldsymbol{y}\notin D$，则存在非零向量 $\boldsymbol{p}$ 使得对每一点 $\boldsymbol{x}\in clD$，有

$$\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\leqslant 0.$$

下面介绍关于两个非空凸集的分离定理.

定理 2.5 设 D_1 和 D_2 是 E^n 中两个非空凸集，$D_1\cap D_2=\varnothing$，则存在非零向量 $\boldsymbol{p}$，使

$$\inf\{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}\in D_1\}\geqslant\sup\{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}\in D_2\}.$$

证明 令 $D=D_2-D_1=\{z\mid z=\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(1)}\in D_1,\boldsymbol{x}^{(2)}\in D_2\}$，由于 D_1 和 D_2 为非空凸集，因此 D 是非空凸集. 由于 $D_1\cap D_2=\varnothing$，则零元素 $\boldsymbol{0}\notin D$. 根据定理 2.4 的推论，存在非零向量 $\boldsymbol{p}$，使得对每一个 $\boldsymbol{z}\in D$，成立 $\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}\leqslant 0$，即

$$\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(1)}\geqslant\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(2)},\ \forall\, \boldsymbol{x}^{(1)}\in D_1,\boldsymbol{x}^{(2)}\in D_2.$$

因此命题得证。

作为凸集分离定理的应用，下面介绍 Farkas 定理和 Gordan 定理，它们在最优化理论中有非常重要的应用.

定理 2.6 Farkas 定理 设 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{c}$ 为 n 维向量，则 $\boldsymbol{Ax}\leqslant\boldsymbol{0},\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}>0$ 有解的充要条件是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{c},\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0}$ 无解.

证明 *必要性* 设 $\boldsymbol{Ax}\leqslant\boldsymbol{0},\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}>0$ 有解，即存在 $\bar{x}$，使 $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}\leqslant\boldsymbol{0}$ 且 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{x}}>0$. 现在证明 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{c},\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0}$ 无解. 用反证法. 设存在 $\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0}$，使

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{c}. \qquad (2.2.9)$$

将(2.2.9)两端转置，并右乘 $\bar{x}$，得

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{x}}. \qquad (2.2.10)$$

由于 $\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0},\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}\leqslant\boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}\leqslant 0$. 从而由(2.2.10)得 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{x}}\leqslant 0$，与 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{x}}>0$ 的假设矛盾.

充分性 设 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{c},\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0}$ 无解，证明 $\boldsymbol{Ax}\leqslant\boldsymbol{0},\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}>0$ 有解. 令

$$D=\{\boldsymbol{z}\mid \boldsymbol{z}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\geqslant\boldsymbol{0}\}, \qquad (2.2.11)$$

显然 D 为闭凸集. 由假设 $c \notin D$, 根据定理2.3, 存在非零向量 x 及数 $\varepsilon > 0$, 使得对每一点 $z \in D$, 成立

$$x^{\mathrm{T}} c \geqslant \varepsilon + x^{\mathrm{T}} z. \tag{2.2.12}$$

由于 $\varepsilon > 0$, 根据(2.2.12), 必有

$$x^{\mathrm{T}} c > x^{\mathrm{T}} z. \tag{2.2.13}$$

两端转置, 并考虑集合 D 的定义, 有

$$c^{\mathrm{T}} x > y^{\mathrm{T}} A x. \tag{2.2.14}$$

在(2.2.14)中, 令 $y = \mathbf{0}$, 得

$$c^{\mathrm{T}} x > 0. \tag{2.2.15}$$

由于 $c^{\mathrm{T}} x$ 为某个确定的数, $y \geqslant \mathbf{0}$, y 的分量可取得任意大, 因此, 由(2.2.14)又可以得

$$A x \leqslant \mathbf{0}. \tag{2.2.16}$$

由(2.2.15)和(2.2.16)知非零向量 x 是 $Ax \leqslant \mathbf{0}$, $c^{\mathrm{T}} x > 0$ 的解.

定理 2.7 Gordan **定理** 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 那么, $Ax < \mathbf{0}$ 有解的充要条件是不存在非零向量 $y \geqslant \mathbf{0}$, 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$.

证明 必要性 设 $Ax < \mathbf{0}$ 有解, 即存在 $\bar{x}$, 使 $A\bar{x} < \mathbf{0}$, 证明不存在非零向量 $y \geqslant \mathbf{0}$, 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$. 设某个非零向量 y 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$, 即

$$y^{\mathrm{T}} A = \mathbf{0}, \tag{2.2.17}$$

两端右乘 $\bar{x}$, 得

$$y^{\mathrm{T}} A \bar{x} = 0. \tag{2.2.18}$$

在(2.2.18)中, 由假设 $A\bar{x} < \mathbf{0}$ 知, y 的诸分量不可能全为非负数, 即 $y \ngeqslant \mathbf{0}$.

充分性 设不存在非零向量 $y \geqslant \mathbf{0}$, 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$, 证明 $Ax < \mathbf{0}$ 有解. 来证明它的等价命题, 即证若 $Ax < \mathbf{0}$ 无解, 则存在非零向量 $y \geqslant \mathbf{0}$ 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$. 设 $Ax < \mathbf{0}$ 无解.

令

$$D_1 = \{z \mid z = Ax, x \in E^n\}, \tag{2.2.19}$$

以及

$$D_2 = \{z \mid z < \mathbf{0}\}. \tag{2.2.20}$$

由于 $Ax < \mathbf{0}$ 无解, 因此 $D_1 \cap D_2 = \varnothing$. 根据定理2.5, 存在非零向量 y, 使得对所有 $x \in E^n$ 及 $z \in D_2$, 下式成立:

$$y^{\mathrm{T}} A x \geqslant y^{\mathrm{T}} z. \tag{2.2.21}$$

特别地, 当 $x = \mathbf{0}$ 时, 有

$$y^{\mathrm{T}} z \leqslant 0, \tag{2.2.22}$$

由于 $z < \mathbf{0}$, 它的分量可取任何负数, 因此由(2.2.22)知

$$y \geqslant \mathbf{0}. \tag{2.2.23}$$

在(2.2.21)中, 令 $z \to \mathbf{0}$, 得到对每个 $x \in E^n$ 均有

$$y^{\mathrm{T}} A x \geqslant 0. \tag{2.2.24}$$

令 $x = -A^{\mathrm{T}} y$,, 代入(2.2.24), 则 $-\| A^{\mathrm{T}} y \| \geqslant 0$, 因此

$$A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}. \tag{2.2.25}$$

由(2.2.23)和(2.2.25)可知存在非零向量 $y \geqslant \mathbf{0}$, 使 $A^{\mathrm{T}} y = \mathbf{0}$.

2.2.3 线性规划解的基本定理

定理 2.8 设 x 是标准线性规划问题的可行解, 那么, x 是基可行解的充要条件是 x

的正分量对应的列向量线性无关.

证明 *必要性* 设 x 是基可行解，那么，由基可行解的定义，可知其正分量为基变量，对应的列向量都是基向量，显然线性无关.

充分性 设 x 的正分量为 $x_1,\cdots,x_k$，其对应的列向量 $P_1,\cdots,P_k$ 线性无关. 显然，$k\leqslant m$.

若 $k=m$ 可用来构成一个基，则 x 是基本解. 而已知 x 是可行解，故 x 又是基可行解；

若 $k<m$，由于 A 的秩为 m，必可从 A 中再挑出 $m-k$ 个列向量，与 $P_1,\cdots,P_k$ 一起构成一个极大线性无关组，即为一个基，由此可知 x 是基可行解.

定理 2.9 设 x 是可行域 D 的极点，那么，x 最多有 m 个正分量.

证明 设 $x=(x_1,\cdots,x_k,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$，若 $k>m$，由于 A 的秩为 m，则 $P_1,\cdots,P_k$ 线性相关，于是存在 k 个不全为零的数 λ_j，使得

$$\sum_{j=1}^{k}\lambda_j P_j = 0.$$

因为 $x\in D$，故

$$\sum_{j=1}^{n}x_j P_j = b \Rightarrow \sum_{j=1}^{k}x_j P_j = b.$$

现构造两个点 $x^{(1)},x^{(2)}$，使满足

$$\begin{cases}x^{(1)} = (x_1+a\lambda_1,\cdots,x_k+a\lambda_k,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}},\\ x^{(2)} = (x_1-a\lambda_1,\cdots,x_k-a\lambda_k,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}.\end{cases}$$

其中，a 是充分小的正数. 显然有

$$x^{(1)}\geqslant 0,\ x^{(2)}\geqslant 0,$$

且

$$Ax^{(1)} = \sum_{j=1}^{k}(x_j+a\lambda_j)P_j = \sum_{j=1}^{k}x_jP_j + a\sum_{j=1}^{k}\lambda_jP_j = b,$$

所以 $x^{(1)}\in D$.

同理 $x^{(2)}\in D$.

注意到 λ_j 不全为零，$a>0$，所以

$$x^{(1)}\neq x^{(2)},$$

但 $x=\frac{1}{2}x^{(1)}+\frac{1}{2}x^{(2)}$.

表明 x 不是 D 的极点，与已知条件矛盾，故

$$k\leqslant m.$$

定理 2.10 对于标准形式的线性规划，基可行解与可行域的极点一一对应.

证明 首先证明极点必是基可行解. 设 x 是极点，由定理 2.9，可设

$$x = (x_1,\cdots,x_k,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}},\ x_j>0,\ k\leqslant m.$$

若 x 不是基可行解，由定理 2.8，向量 $P_1,\cdots,P_k$ 应线性相关. 仿照定理 2.9 证明过程，可推导出 x 不是极点，与已知条件矛盾. 故可知 x 必是基可行解.

其次证明基可行解必是极点. 设 x 是基可行解，由定义，可设其对应的基向量为 P_1，

$\cdots, \boldsymbol{P}_m$，于是，可设 $\boldsymbol{x}$ 为

$$\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_m, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}.$$

若 $\boldsymbol{x}$ 不是极点，则存在异于 $\boldsymbol{x}$ 的两个点 $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}$，且 $\boldsymbol{x}^{(1)} \neq \boldsymbol{x}^{(2)}$，以及数 $\lambda \in (0,1)$，使得

$$\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}^{(1)} + (1-\lambda)\boldsymbol{x}^{(2)},$$

上式的分量表达形式为

$$x_j = \lambda x_j^{(1)} + (1-\lambda) x_j^{(2)}, \quad j = 1, 2, \cdots, n.$$

显然，当 $j > m$ 时，有

$$x_j = x_j^{(1)} = x_j^{(2)} = 0. \tag{2.2.26}$$

再由 $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}$ 均是可行点，故

$$\sum_{j=1}^{m} x_j^{(i)} \boldsymbol{P}_j = \boldsymbol{b}, \quad i = 1, 2.$$

两式相减，得

$$\sum_{j=1}^{m} (x_j^{(1)} - x_j^{(2)}) \boldsymbol{P}_j = \boldsymbol{0}.$$

已知 $\boldsymbol{P}_1, \cdots, \boldsymbol{P}_m$ 线性无关，所以有

$$x_j^{(1)} = x_j^{(2)}, \quad j = 1, 2, \cdots, m. \tag{2.2.27}$$

综合(2.2.26)，(2.2.27)，应有 $\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$，与已知条件矛盾，所以 $\boldsymbol{x}$ 必是极点.

推论 线性规划可行域 D 必有且只有有限个极点.

定理 2.10 指出了一种求解线性规划问题的可能途径，这就是先确定线性规划问题的基.如果是可行基，则计算相应的基可行解以及相应解的目标函数值. 由于基的个数是有限的(最多 C_n^m 个)，因此必定可以从有限个基可行解中找到使目标函数为最优(极大或极小)的解.但是，线性规划的基的个数随着问题规模的增大而很快增加，以致实际应用上成为不可穷尽的. 举例来说，一个有 50 个变量、20 个约束等式的线性规划问题. 其最多可能有 $C_{50}^{20} = \frac{50!}{20!\,30!} = 4.7 \times 10^{13}$ 个. 很显然，借助于定理 2.10 求解线性规划问题，哪怕是规模不大的问题，实际应用上也是不可能的.

下面不加证明地直接引用有关可行域 D 的重要结论(通常称之为表现定理).

表现定理 设 D 是线性规划的可行域，则

(1) 当 D 有界时，D 中任意一点均可表示为其极点的凸组合；

(2) 当 D 无界时，必有且只有有限个极方向. 设若 D 有 k 个极点 $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}^{(k)}$，有 L 个极方向 $\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2, \cdots, \boldsymbol{d}_L$，则 D 中任一点 $\boldsymbol{x}$ 可表示为

$$\boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \boldsymbol{x}^{(j)} + \sum_{j=1}^{L} \mu_j \boldsymbol{d}_j.$$

其中，$\lambda_j \geqslant 0$，$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1$，$\mu_j \geqslant 0$.

反之，满足上述条件的点必是可行点.

定理 2.11 如果标准线性规划的可行域 D 有界，则必有某个极点是最优解.

证明 由定理 2.1 知，D 是闭凸集，又目标函数是连续函数，故必可在 D 上达到最小值，设最小值点为 $\bar{\boldsymbol{x}}$，$\bar{\boldsymbol{x}} \in D$.

若 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是极点，则定理已得证. 若 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 不是极点，可设 D 的极点为 $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}^{(k)}$，由

表现定理，已知存在 k 个非负数 λ_j，使

$$\bar{x} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j x^{(j)}, \sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1.$$

由于只有有限个极点，故必存在极点 $x^{(L)}$，满足

$$cx^{(L)} = \min cx^{(i)}, \quad l \leqslant i \leqslant k,$$

则
$$c\bar{x} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j cx^{(j)} \geqslant cx^{(L)} \sum_{j=1}^{k} \lambda_j = cx^{(L)},$$

表明极点 $x^{(L)}$ 也是一个最小值点(最优解).

当可行域无界时，线性规划不一定存在最优解，但是有如下关于最优解的定理成立.

定理 2.12 设线性规划的可行域 D 无界，$x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(k)}$ 是全部极点，$d_1, \cdots, d_L$ 是全部极方向，那么

(1) 最优解存在的充要条件是

$$cd_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,L;$$

(2) 若存在最优解，则有某个极点是最优解.

证明 (1) 由表现定理，对任一可行点 x，有

$$x = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j x^{(j)} + \sum_{j=1}^{L} \mu_j d_j.$$

其中
$$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1, \lambda_j \geqslant 0, \mu_j \geqslant 0.$$

原线性规划可化为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = c\left(\sum_{j=1}^{k} \lambda_j x^{(j)} + \sum_{j=1}^{L} \mu_j d_j \right), \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1, \\ & \lambda_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,k, \\ & \mu_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,L. \end{aligned}$$

若存在某个 j，使 $cd_j<0$，那么，令相应的 μ_j 任意大，则对应的点 x 仍为可行点，但所得的目标函数值将任意小，不存在最优解；反之，易知当存在最优解时，不可能存在使 $cd_j<0$ 的 j. 于是，定理的结论(1)成立.

(2) 设存在最优解，由(1)可知

$$cd_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,L.$$

于是，对任一可行点 x，有

$$\begin{aligned} cx &= c\left(\sum_{j=1}^{k} \lambda_j x^{(j)} + \sum_{j=1}^{k} \mu_j d_j \right) = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j cx^{(j)} + \sum_{j=1}^{k} \mu_j cd_j \\ &\geqslant \sum_{j=1}^{k} \lambda_j cx^{(j)} \geqslant \sum_{j=1}^{k} \lambda_j (\min cx^{(i)}) = \min cx^{(i)}, \quad i = 1,2,\cdots,k. \end{aligned}$$

显然，存在某个极点 $x^{(j)}$，使

$$cx^{(j)} = \min cx^{(i)}, \quad 1 \leqslant i \leqslant k,$$

即

$$cx \geqslant cx^{(j)},$$

表明极点 $x^{(j)}$ 是最优解(最小值点).

2.3 单纯形法

单纯形法(simplex method)是解线性规划问题的一种通用的有效算法，这种方法是G.B.Dantzig在1947年提出的，后来人们又进行了一些改进. 几十年的实践表明，单纯形方法不仅是求解线性规划的基本方法，而且是非线性规划和整数规划中某些算法的基础.

2.3.1 单纯形法的基本思想

定理2.10已经指出，一个线性规划问题若有最优解，则一定有最优的基本可行解，而且基本可行解的个数是有限的. 因此，一个求解线性规划问题的直观想法是把所有的基本可行解求出来，并求出其相应的目标函数值，相互比较，即可求得其中相应目标函数的最优解. 但是，当线性规划问题的阶数 m 与维数 n 很小时是可行的；当 m,n 较大时，计算量非常大. 单纯形法是一种计算量较小的方法.

单纯形法是一种迭代算法，其基本思想和主要步骤是：首先设法找到一个(初始)基可行解，然后再根据最优性理论判断这个基可行解是否为最优解. 若是最优解，则输出结果，计算停止；若不是最优解，则设法由当前的基可行解产生一个目标值更优的新的基可行解，再利用最优性理论对所得的新基可行解进行判断，看其是否为最优解，这样就构成一个迭代算法. 由于基可行解只有有限个，而每次目标值都有所改进，因而必可在有限步内终止. 如果原问题确有最优解，必可在有限步内达到；若原问题无最优解，也可根据最优解理论及时发现，停止计算，避免错误及无效运算.

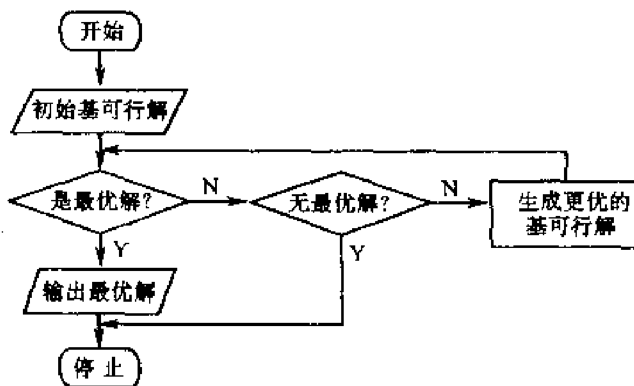


图 2.2

单纯形法的主要步骤流程如图2.2.

2.3.2 初始基可行解

单纯形法的出发点是具有如下特殊形式的约束方程组的标准线性规划：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n, \\
\text{s.t.} \quad & x_1 + a_{1,m+1}x_{m+1} + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\
& x_2 + a_{2,m+1}x_{m+1} + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\
& \cdots\cdots\cdots\cdots \\
& x_m + a_{m,m+1}x_{m+1} + \cdots + a_{mn}x_n = b_m, \\
& x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,\cdots,n, \\
& b_i \geqslant 0, \quad i = 1,2,\cdots,m,
\end{aligned}
$$

即其系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可表示为

$$A=(I,N).$$

可选择该单位矩阵 I 作为初始基 B_0(以单位矩阵构成的基称为该问题的标准基), 则可以得到对应的初始基可行解为

$$x^{(0)}=(b_1,b_2,\cdots,b_m,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}.$$

2.3.3 最优性准则

2.3.3.1 目标函数的非基变量表达式

设问题为

$$\min \quad Z=cx \tag{2.3.1}$$

$$\text{s.t.} \quad Ax=b, b\geqslant 0 \tag{2.3.2}$$

$$x\geqslant 0 \tag{2.3.3}$$

不失一般性, 设 $A=(B,N)$, 其中 B 是基, 相应地, 设基变量构成的向量为 x_B, 非基变量构成的向量为 x_N, 价格向量 c 中, 基变量向量 x_B 对应的价格向量为 c_B, 非基变量向量 x_N 对应的价格向量为 c_N, 即

$$\begin{aligned}
B&=(P_1,P_2,\cdots,P_m),\\
N&=(P_{m+1},P_{m+2},\cdots,P_n),\\
x_B&=(x_1,x_2,\cdots,x_m)^{\mathrm{T}},\\
x_N&=(x_{m+1},x_{m+2},\cdots,x_n)^{\mathrm{T}},\\
c_B&=(c_1,c_2,\cdots,c_m),\\
c_N&=(c_{m+1},c_{m+2},\cdots,c_n).
\end{aligned}$$

则原问题可表示为

$$\min \quad Z=c_Bx_B+c_Nx_N, \tag{2.3.1$'$}$$

$$\text{s.t.} \quad Bx_B+Nx_N=b, \tag{2.3.2$'$}$$

$$x_B\geqslant 0, x_N\geqslant 0. \tag{2.3.3$'$}$$

因此

$$x_B=B^{-1}b-B^{-1}Nx_N. \tag{2.3.4}$$

任取一个可行解 x, 必满足(2.3.2)′, 则其对应的目标函数值为

$$\begin{aligned}
Z=cx&=c_Bx_B+c_Nx_N\\
&=c_B(B^{-1}b-B^{-1}Nx_N)+c_Nx_N\\
&=c_BB^{-1}b+(c_N-c_BB^{-1}N)x_N.
\end{aligned}$$

记

$$Z_0=c_BB^{-1}b. \tag{2.3.5}$$

同时, 注意到 c_N,N,x_N 的表达式, 有

$$\begin{aligned}
c_N-c_BB^{-1}N&=(c_{m+1}-c_BB^{-1}P_{m+1},c_{m+2}-c_BB^{-1}P_{m+2},\cdots,c_n-c_BB^{-1}P_n)\\
&=(\sigma_{m+1},\sigma_{m+2},\cdots,\sigma_n).
\end{aligned}$$

其中

$$\sigma_j=c_j-c_BB^{-1}P_j, \quad j=m+1,\cdots,n, \tag{2.3.6}$$

于是有

$$Z=Z_0+(\sigma_{m+1},\sigma_{m+2},\cdots,\sigma_n)(x_{m+1},x_{m+2},\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$$

$$= Z_0 + \sum_{j=m+1}^{n} \sigma_j x_j. \tag{2.3.7}$$

以后将(2.3.6)所示的 σ_j 称为可行解 x 所对应的检验数(判别数)，因为将用它来检验当前的基可行解 x 是否为最优解.

2.3.3.2 最优解判定定理

定理 2.13 设 B 是线性规划(2.3.1)′～(2.3.3)′的基

$$b' = B^{-1}b = (b'_1, b'_2, \cdots, b'_m)^{\mathrm{T}} \geqslant 0,$$

$x^{(0)}$是与 B 对应的基可行解，即

$$x^{(0)} = (b'_1, b'_2, \cdots, b'_m, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}.$$

如果 x 所有的检验数 $\sigma_j \geqslant 0$，则 $x^{(0)}$是最优解.

证明 由(2.3.7)，$x^{(0)}$对应的目标函数值为

$$Z^{(0)} = cx^{(0)} = Z_0.$$

现任取一个可行解 x，则由(2.3.7)，其对应目标值为

$$Z = cx = Z_0 + \sum_{j=m+1}^{n} \sigma_j x_j \geqslant Z_0 = Z^{(0)},$$

表明，$x^{(0)}$是最优解.

例 2.7 已知线性规划为

$$\begin{aligned}
\min \quad & Z = 3x_1 + 2x_2 + x_3 - 2x_4, \\
\text{s.t.} \quad & x_1 - x_2 + x_3 + 6x_4 = 9, \\
& -x_1 + 3x_2 + x_3 - 2x_4 = 1, \\
& x_1, \quad x_2, \quad x_3, \quad x_4 \geqslant 0.
\end{aligned}$$

$\bar{x} = (0, 3/2, 0, 7/4)^{\mathrm{T}}$，试证明 $\bar{x}$ 是最优解.

证明 取基 $B = (P_2, P_4)$，容易验证 $\bar{x}$ 是与 B 对应的基可行解. 且

$$B = \begin{pmatrix} -1 & 6 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}, B^{-1} = \frac{1}{16}\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

非基变量 x_1, x_3 对应的检验数为

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= c_1 - (c_2, c_4)B^{-1}P_1 \\
&= 3 - (2, -2)\begin{pmatrix} 2/16 & 6/16 \\ 3/16 & 1/16 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{15}{4}, \\
\sigma_3 &= c_3 - (c_2, c_4)B^{-1}P_3 \\
&= 1 - (2, -2)\begin{pmatrix} 2/16 & 6/16 \\ 3/16 & 1/16 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

根据定理 2.13 知，$\bar{x}$ 是最优解.

2.3.3.3 无最优解的判定定理

若线性规划问题的可行域无界，那么有可能不存在最优解，显然，在实际计算过程中，应当设法及早判别原问题是否存在最优解，以免做无意义的运算. 下面的定理将提供一个判别原问题不存在最优解的充分条件.

定理 2.14 设 B 是线性规划问题(2.3.1)～(2.3.3)的基，若存在检验数 $\sigma_{m+t} < 0$，且对应的列向量满足 $P'_{m+t} = B^{-1}P_{m+t} \leqslant 0$，则原问题不存在最优解.

证明 构造一个 n 维向量 $x^{(\lambda)}$，其基变量部分为

$$x_B^{(\lambda)} = B^{-1}b - \lambda B^{-1}P_{m+t};$$

其非基向量部分为

$$x_N^{(\lambda)} = (0, \cdots, 0, \lambda, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}.$$

其中，λ 是非基变量 x_{m+t} 的取值.

由于已知

$$B^{-1}b \geqslant 0,\ B^{-1}P_{m+t} \leqslant 0,$$

所以对任意的正数 λ，有

$$x^{(\lambda)} \geqslant 0,$$

且 $$Ax^{(\lambda)} = Bx_B^{(\lambda)} + Nx_N^{(\lambda)} = B(B^{-1}b - \lambda B^{-1}P_{m+t}) + Nx_N^{(\lambda)}.$$

注意到

$$Nx_N^{(\lambda)} = (P_{m+1}, P_{m+2}, \cdots, P_n)(0, \cdots, 0, \lambda, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}} = \lambda P_{m+t},$$

于是有 $$Ax^{(\lambda)} = b - \lambda P_{m+t} + \lambda P_{m+t} = b.$$

所以 $x^{(\lambda)}$ 是可行解，且其对应的目标函数值为

$$Z^{(\lambda)} = cx^{(\lambda)} = Z_0 + \sum_{j=m+1}^{n} \sigma_j x_j = Z_0 + \lambda\sigma_{m+t}.$$

当 $\lambda \to +\infty$ 时，有 $Z^{(\lambda)} \to -\infty$，表明原问题不存在最优解.

2.3.4 基可行解的迭代与改进

2.3.4.1 新的基可行解的产生

设线性规划的约束方程组的系数矩阵为

$$A = (I, N),$$

取基为 $$B_0 = I = (P_1, P_2, \cdots, P_m),$$

则其对应的基可行解为

$$x^{(0)} = (b_1, b_2, \cdots, b_m, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}.$$

显然，用 A 的列向量 P_{m+t} 替换 B 中的列向量 P_l，所得的新矩阵为

$$B_1 = (P_1, P_2, \cdots, P_{l-1}, P_{m+t}, P_{l+1}, \cdots, P_m).$$

如果 B_1 仍然是非奇异矩阵，则 B_1 可取为新的基. 这里，称 P_{m+t} 为入基向量，P_l 为出基向量，对应地，称 x_{m+t} 为入基变量，x_l 为出基变量.

入基变量和出基变量的选择必须保证：

(1) 替换后所得的矩阵是非奇异的；

(2) 对应的基本解是可行解.

原线性规划问题的约束方程组见表 2.2.

显然，只要 $a_{l,m+t} \neq 0$，则向量组 $P_1, P_2, \cdots, P_{l-1}, P_{l+1}, \cdots, P_m, P_{m+t}$ 必定线性无关，可构成新的基 B_1. 为求得新基 B_1 所对应的基本解 $x^{(1)}$，可利用关于行的初等变换将向量 P_{m+t} 化为单位向量 e_l（即使得第 $m+t$ 列的第 l 个元素化为 1，而这列的其余元素均为 0），同时表 2.2化为表 2.3.

表 2.2

x_1	x_2	$\cdots$	x_j	$\cdots$	x_m	x_{m+1}	$\cdots$	x_{m+t}	$\cdots$	x_n	b
1	0	$\cdots$	0	$\cdots$	0	$a_{1,m+1}$	$\cdots$	$a_{1,m+t}$	$\cdots$	a_{1n}	b_1
0	1	$\cdots$	0	$\cdots$	0	$a_{2,m+1}$	$\cdots$	$a_{2,m+t}$	$\cdots$	a_{2n}	b_2
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
0	0	$\cdots$	1	$\cdots$	0	$a_{l,m+1}$	$\cdots$	$a_{l,m+t}$	$\cdots$	a_{ln}	b_l
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
0	0	$\cdots$	0	$\cdots$	1	$a_{m,m+1}$	$\cdots$	$a_{m,m+t}$	$\cdots$	a_{mn}	b_m

表 2.3

x_1	x_2	$\cdots$	x_l	$\cdots$	x_m	x_{m+1}	$\cdots$	x_{m+t}	$\cdots$	x_n	b
1	0	$\cdots$	a'_{1l}	$\cdots$	0	$a'_{1,m+1}$	$\cdots$	0	$\cdots$	a'_{1n}	b'_1
0	1	$\cdots$	a'_{2l}	$\cdots$	0	$a'_{2,m+2}$	$\cdots$	0	$\cdots$	a'_{2n}	b'_2
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
0	0	$\cdots$	a'_{ll}	$\cdots$	0	$a'_{l,m+1}$	$\cdots$	1	$\cdots$	a'_{ln}	b'_l
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
0	0	$\cdots$	a'_{ml}	$\cdots$	1	$a'_{m,m+1}$	$\cdots$	0	$\cdots$	a'_{mn}	b'_m

由表 2.3 可知，基 $\boldsymbol{B}_1$ 对应的基本解 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 为

$$\begin{cases} x_j^{(1)} = b'_j, & \text{当 } j \leqslant m, \text{且 } j \neq l, \\ x_{m+t}^{(1)} = b'_l, & \\ x_j^{(1)} = 0, & \text{对其余的 } j. \end{cases}$$

为使 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 成为可行解，必须使所有的 b'_j 成为非负数.

先研究表 2.2 和表 2.3 中数据的相互关系. 显然，表 2.3 中

$$\begin{cases} a'_{lj} = a_{lj}/a_{l,m+t}, \\ b'_l = b_l/a_{l,m+t}. \end{cases}$$

注意到 $b_l>0$，欲使 $b'_l>0$，必须有 $a_{l,m+t}>0$. 其次，当 $i \neq l$ 时，有

$$\begin{cases} a'_{ij} = a'_{lj}(-a_{i,m+t}) + a_{ij} = a_{ij} - \dfrac{a_{i,m+t}}{a_{l,m+t}} a_{lj}, \\ b'_i = b'_l(-a_{i,m+t}) + b_i = b_i - \dfrac{b_l}{a_{l,m+t}} a_{i,m+t}. \end{cases}$$

令 $b'_i \geqslant 0$，则有

$$\frac{b_l}{a_{l,m+t}} \leqslant \frac{b_i}{a_{i,m+t}}, \qquad \text{当 } a_{i,m+t} > 0.$$

所以，主元素 $a_{l,m+t}$ 的行下标 l 应满足

$$\frac{b_l}{a_{l,m+t}} = \min_i \left\{ \frac{b_i}{a_{i,m+t}} \middle| a_{i,m+t} > 0 \right\}. \tag{2.3.8}$$

按(2.3.8)确定主元 $a_{l,m+t}$ 所在行的方法称为 θ 准则.

2.3.4.2　基可行解的改进

首先，给出如下的命题.

命题　若检验数 $\sigma_{m+t}<0$，那么，按照(2.3.8)选取主元 $a_{l,m+t}$，并进行换基迭代后所

得到的新的基可行解 $x^{(1)}$ 优于原来的可行解 $x^{(0)}$.

证明 $x^{(1)}$ 所对应的目标函数值为

$$cx^{(1)} = Z_0 + b'_r\sigma_{m+t} < Z_0 = cx^{(0)}.$$

此命题表明，只要选取负检验数对应的变量为入基变量，并对该列元素按(2.3.8)所示的 θ 准则确定主元，再进行换基迭代，则必可得到一个优于原基可行解的新的基可行解.

2.3.5 单纯形表及其计算步骤

在前面，利用当前基的逆矩阵计算出对应的基可行解及检验数. 现在，介绍利用表格，即单纯形表来计算基可行解和检验数的方法.

设问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, b \geqslant 0, \\ & x \geqslant 0, \end{aligned}$$

记

$$A = (B, N).$$

其中，B 是当前的基. 同时，目标改写为

$$-Z + cx = 0. \tag{2.3.9}$$

将 Z 视为由向量 x 所决定的变量，则原问题的原始数据见表 2.4.

表 2.4

Z	x_B	x_N	b
0	B	N	b
-1	c_B	c_N	0

表 2.4 的中间部分为约束方程组的系数，下面一行为目标行(2.3.9)的有关数据. 对表 2.4 的数据施行关于行的初等变换，则可化为表 2.5.

表 2.5

Z	x_B	x_N	b
0	I	N'	b'
-1	0	c'_N	η'

在表 2.5 中，基变量所对应的系数矩阵 B 已化成单位矩阵 I，且最下一行中基变量对应的价格系数向量 c_B 已化为零向量，这样的表格称为单纯形表.

单纯形表可以提供丰富的信息，下面讨论表中各数据的意义.

不失一般性，可假设 $b' \geqslant 0$(这一点可通过按(2.3.8)挑选换基迭代的主元而实现)，那么，表 2.5 等价于

$$\begin{cases} x_B + N'x_N = b', \\ -Z + c'_N x_N = \eta'. \end{cases}$$

令非基变量 $x_N = 0$，则有

$$\begin{cases} x_B = b', \\ Z = -\eta'. \end{cases}$$

表明，若 B 是可行基，则 b' 的分量是基 B 所对应的基变量的值，而 $-\eta'$ 则是对应的基可行解的目标函数值.

下面再看向量 c'_N 的意义．将表 2.5 与表 2.4 对比，可以看出，实质上是将表 2.4 的中间行(即约束方程组系数增广矩阵)的各项同乘以当前基 $\boldsymbol{B}$ 的逆矩阵$\boldsymbol{B}^{-1}$，再将中间行各项乘以 $-c_B$ 后加到最后一行上，即表 2.5 实质上是表 2.6．

表 2.6

Z	x_B	x_N	b
0	I	$B^{-1}N$	$B^{-1}b$
-1	0	$c_N-c_BB^{-1}N$	$-c_BB^{-1}N$

对比表 2.5，有

$$c'_N = c_N - c_B\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N},$$

即 c'_N 是非基变量x_N 所对应的检验数向量，另外

$$b' = \boldsymbol{B}^{-1}b,$$
$$-\eta' = c_B\boldsymbol{B}^{-1}b.$$

再一次说明了 b'代表基变量的取值，而 $-\eta'$则代表目标函数值．

由上面的分析可知，利用单纯形表可以很方便地计算出基可行解、目标函数值及检验数，因而可以用来求解线性规划问题．

注意到表 2.4～2.6 中，目标变量 Z 所在列的数据始终没有发生过变化，为使表中数据简明，可删去这列．今后所讲的单纯形表，均不必包含 Z 列．

下面介绍利用单纯形表求解线性规划的步骤：

(1) 将线性规划标准化，并使之含有标准基(即有一个与约束方程的个数同阶的单位矩阵)．

(2) 按表 2.4 的形式填好原始数据(可不填 Z 列)，并化为表 2.5 所示的单纯形表．

(3) 检查非基变量所对应的检验数 σ_j．若所有的 $\sigma_j\geqslant0$，则当前的基可行解就是最优解，计算停止；若存在负检验数，转(4)．

(4) 若某个 $\sigma_k<0$，且所对应的列向量 $\boldsymbol{P}'_k$ 没有正分量，则表明原问题不存在最优解，计算停止；否则，转(5)．

(5) 设最小的负检验数为 σ_k，则取 x_k 为入基变量．并在对应的列向量 $\boldsymbol{P}'_k$ 中确定一个正分量 a'_{lk}为主元，使之满足

$$\frac{b'_l}{a'_{lk}} = \min_i\left\{\frac{b'_i}{a'_{ik}}\,\middle|\,a'_{ik}>0\right\},$$

即表明原来基中的变量 x_l 退出基．转(6)．

(6) 以 a'_{lk}为主元，用行的初等变换将 a'_{lk}化为 1，第 k 列的其余元素(包括对应的检验数 σ_k)全部化为零，得到新的单纯形表，转(3)．

例 2.8 求解线性规划问题

$$\begin{aligned}
\max\quad & Z = -3x_1 - 2x_2 - x_3 + 2x_4,\\
\text{s.t.}\quad & x_1 - 2x_2 + \qquad 4x_4 = 4,\\
& \qquad x_2 + x_3 + 2x_4 = 5,\\
& x_j \geqslant 0,\quad j = 1,2,3,4.
\end{aligned}$$

解 将原问题化为标准形式，得

$$\min \quad Z' = 3x_1 + 2x_2 + x_3 - 2x_4,$$
$$\text{s.t.} \quad x_1 - 2x_2 + \quad 4x_4 = 4,$$
$$x_2 + x_3 + 2x_4 = 5,$$
$$x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3,4.$$

其中
$$\boldsymbol{c} = (c_1, c_2, c_3, c_4) = (3, 2, 1, -2),$$
$$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2)^{\mathrm{T}} = (4, 5)^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2, \boldsymbol{P}_3, \boldsymbol{P}_4) = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

$\boldsymbol{A}$ 中已含有一个标准基
$$\boldsymbol{B}_0 = (\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_3) = \boldsymbol{I},$$
将上述数据填入数据表，可得表 2.7.

表 2.7

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1	−2	0	4	4
0	1	1	2	5
3	2	1	−2	0

将最后一行中的 3 和 1 用行初等变化为 0，可得(初始)单纯形表(见表 2.8).

表 2.8

x_1	x_2	x_3	x_4	b	b_i/a_{i4}
1	−2	0	(4)	4	1
0	1	1	2	5	2.5
0	7	0	−16	−17	

对应的基可行解为
$$\boldsymbol{x} = (4, 0, 5, 0)^{\mathrm{T}}, \text{目标值为 } 17.$$

在表 2.8 中，存在检验数
$$\sigma_4 = -16 < 0, \text{且 } a_{14} = 4 > 0, a_{24} = 2 > 0.$$

由 θ 规则，有
$$\frac{b_1}{a_{14}} = \frac{4}{4} = \min\left\{\frac{4}{4}, \frac{5}{2}\right\} = \min\left\{\frac{b_1}{a_{14}}, \frac{b_2}{a_{24}}\right\}.$$

所以，应选 a_{14}为主元，并为计算方便起见，在单纯形表(见表 2.8)中将主元用括号括起来. 接着进行换基迭代，可得新的单纯形表(见表 2.9).

表 2.9

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1/4	−1/2	0	1	1
−1/2	(2)	1	0	3
4	−1	0	0	−1

对应的可行解为
$$\boldsymbol{x} = (0, 0, 3, 1)^{\mathrm{T}}, \text{目标函数值为 } 1.$$

由表 2.9 可看出，还存在检验数 $\sigma_2=-1$，且系数矩阵的第 2 列仅有一个正元素 $a_{22}=2$，应选为主元，继续迭代，可得表 2.10.

表 2.10

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1/8	0	1/4	1	7/4
−1/4	1	1/2	0	3/2
15/4	0	1/2	0	1/2

在表 2.10 中，检验数依次为

$$\sigma_1=15/4,\ \sigma_2=0,\ \sigma_3=1/2,\ \sigma_4=0,$$

全部大于或等于零，由最优解判别定理，已达最优解. 最优解为

$$\boldsymbol{x}^*=(0,3/2,0,7/4)^{\mathrm{T}}.$$

最优基为

$$\boldsymbol{B}^*=(\boldsymbol{P}_4,\boldsymbol{P}_2)=\begin{pmatrix}4 & -2\\ 2 & 1\end{pmatrix}.$$

最优值为

$$Z^*=-1/2.$$

2.4 人工变量单纯形法

只有当存在初始的标准基时，才能使用单纯形法求解线性规划问题. 如果欲求解的线性规划不存在标准基，就必须想办法变换出一个标准基. 但是，在变换的过程中，应当满足：第一，应保持约束方程组的解集不变，即原问题的可行域不变，应当进行同解变换；第二，在获得标准基的同时，应使约束方程组右边的资源向量保持非负，这样才能使用上述单纯形法求解. 一般来说，第一点要求是容易实现的，例如利用线性代数中的初等变换就可以办到. 然而，要同时满足这两点要求，采用常规的方法往往顾此失彼，很难达到要求. 因此，应研究有效的办法来解决这个问题，下面介绍两种常见的方法.

2.4.1 大 M 法(big-M method)

大 M 法的基本思想是，如果原问题标准化后的约束方程中无标准基，则可以在约束方程中添加人工变量(artificial variable)，使之构成含有标准基的新问题. 显然，在新问题的某个解中，如果人工变量对应的分量是正数，则该解必不是原问题的可行解. 因此，欲从新问题的解得到原问题的解，必须使新问题的可行解中的人工变量为零，而要达到这一点只需使人工变量全部成为非基变量即可. 对极小化问题，可在原目标函数中加入绝对值充分大的正系数人工变量. 这样，当对新问题用单纯形法求解时，在新目标函数的值逐步减小的迭代过程中，人工变量就会逐步退出基.

设原问题为

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=\boldsymbol{c}\boldsymbol{x},\\ \text{s.t.}\quad & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b},\\ & \boldsymbol{x}\geqslant \boldsymbol{0}.\end{aligned}$$

引入人工变量

$$y=(y_1,y_2,\cdots,y_m)^{\mathrm{T}},$$

可得含有标准基的大 M 法新问题

$$\begin{aligned}\min\quad & Z'=cx+M\sum_{i=1}^{m}y_i,\\ \text{s.t.}\quad & Ax+Iy=b,\\ & x\geqslant 0,y\geqslant 0.\end{aligned}$$

其中，M 是充分大的正数，I 是 m 阶单位矩阵.

下面讨论新问题与原问题之间的关系. 首先要指出，新问题必有可行解，例如 $\bar{x}=0$，$\bar{y}=b$ 就是新问题的一个可行解. 于是，对新问题求解，其结果有两种可能.

(1) 新问题无最优解

此时可断言原问题无最优解. 因为在此种条件下，新问题存在可行点列$(x^{(k)},y^{(k)})$，使得

$$Ax^{(k)}+Iy^{(k)}=b,x^{(k)}\geqslant 0,y^{(k)}\geqslant 0,$$

且

$$Z^{(k)'}=cx^{(k)}+M\sum_{i=1}^{m}y_i^{(k)}\to-\infty,\quad k\to+\infty.$$

注意到 M 为充分大正数，故上式表明必有

$$y^{(k)}=0,$$
$$Ax^{(k)}=b,x^{(k)}\geqslant 0,$$

即 $x^{(k)}$是原问题的可行点列. 且其对应的目标函数值有

$$Z^{(k)}=cx^{(k)}=Z^{(k)'}\to-\infty,\quad k\to+\infty,$$

表明原问题没有最优解.

(2) 新问题有最优解

设为$(\bar{x},\bar{y})$. 则有

① 若 $\bar{y}=0$，则新问题的目标函数值为 $c\bar{x}$，且易知 $\bar{x}$ 是原问题的一个可行解. 现任取原问题的一个可行解 x，显然$(x,0)$是新问题的可行解，且其对应的目标函数值为 $Z'=cx$，于是有

$$Z'=cx\geqslant\min Z'=\bar{Z}'=c\bar{x}=\bar{Z}.$$

表明，$\bar{x}$ 是原问题的最优解.

(2) 若存在某个 $\bar{y}_i>0$，则原问题没有可行解，因为此时新问题的最优值为

$$\bar{Z}'=c\bar{x}+M\bar{y}_i.$$

若原问题存在可行解 x_0，则$(x_0,0)$必是新问题的可行解，对应的目标值为 $Z'_0=cx_0$，于是有

$$c\bar{x}+M\bar{y}_i=\bar{Z}'\leqslant Z'_0=cx_0.$$

由于 $\bar{y}_i>0$，M 为充分大的正数，上式显然不可能成立. 所以原问题没有可行解.

例 2.9 用大 M 法求解线性规划

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=-x_1-2x_2-3x_3+x_4,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+2x_2+3x_3=15,\\ & 2x_1+x_2+5x_3=20,\\ & x_1+2x_2+x_3+x_4=10,\\ & x_i\geqslant 0,\quad i=1,2,3,4.\end{aligned}$$

解　引入两个人工变量 y_2, y_3，以及充分大的正数 M，原问题化为如下新问题：

$$
\begin{aligned}
\min\quad & Z' = -x_1 - 2x_2 - 3x_3 + x_4 + My_2 + My_3,\\
\text{s.t.}\quad & x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 = 10,\\
& x_1 + 2x_2 + 3x_3 + y_2 = 15,\\
& 2x_1 + x_2 + 5x_3 + y_3 = 20,\\
& x_i \geqslant 0, y_2 \geqslant 0, y_3 \geqslant 0,\quad i = 1,2,3,4.
\end{aligned}
$$

此时，已拥有一个标准基，可用单纯形法求解，其计算过程及结果见表 2.11.

在表 2.11 中，人工变量 y_2, y_3 全部出基，故原问题的最优解及最优值为

$$x^* = (\frac{5}{2}, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}, 0)^T,$$

$$Z^* = -Z^{*'} = -(15) = -15.$$

表 2.11

c_j	-1	-2	-3	1	M	M	
	x_1	x_2	x_3	x_4	y_2	y_3	
初始表 I	1	2	1	1	0	0	10
	1	2	3	0	1	0	15
	2	1	(5)	0	0	1	20
	$-2-3M$	$-4-3M$	$-4-8M$	0	0	0	$-10-35M$
迭代表 2	3/5	9/5	0	1	0	$-1/5$	6
	$-1/5$	(7/5)	0	0	1	$-3/5$	3
	2/5	1/5	1	0	0	1/5	4
	$(M-2)/5$	$-(7M+16)/5$	0	0	0	$(8M+4)/5$	$-3M+6$
迭代表 3	(6/7)	0	0	1	$-9/7$	4/7	15/7
	$-1/7$	1	0	0	5/7	$-3/7$	15/7
	3/7	0	1	0	$-1/7$	2/7	25/7
	$-6/7$	0	0	0	$(7M+16)/7$	$(7M-4)/7$	90/7
最优表	1	0	0	7/6	$-3/2$	2/3	5/2
	0	1	0	1/6	1/2	$-1/3$	5/2
	0	0	1	$-1/2$	1/2	0	5/2
	0	0	0	4	$M+1$	M	15

例 2.10　用大 M 法求解

$$
\begin{aligned}
\min\quad & Z = -2x_1 - x_2,\\
\text{s.t.}\quad & x_1 + x_2 \geqslant 5,\\
& x_1 + x_2 \leqslant 3,\\
& x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

显然，本问题的可行域是空集，根据有关大 M 法新模型的讨论，在大 M 法新模型的最优解中，人工变量所对应的分量应该是正数．下面通过用大 M 法求解来证实这一点．

解　先将原问题标准化，再引入人工变量 y，可得如下的大 M 法新问题：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & Z = -2x_1 - x_2 + My, \\
\text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 - x_3 + \qquad y = 5, \\
& x_1 + x_2 + \qquad x_4 \quad = 3, \\
& x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4, y \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

其计算过程及结果见表 2.12.

从表 2.12 的最优表可知，在大 M 法新问题的最优解中，人工变量 y 的值是正数 2，证实了原问题没有可行解.

表 2.12

c_j	-2	-1	0	0	M	
	x_1	x_2	x_3	x_4	y	b
初始表	1	1	-1	0	1	5
	(1)	1	0	1	0	3
	$-M-2$	$-M-1$	M	0	0	$-5M$
最优表	0	0	-1	-1	1	2
	1	1	0	1	0	3
	0	1	M	$M+2$	0	$-2M+6$

2.4.2 两阶段单纯形法(two-phase method)

两阶段单纯形法也是一种人工变量法，它的算法可分为两个阶段：第一阶段，引入人工变量，构造一个具有标准基的新线性规划，求解这个新线性规划，其结果将有两种可能，或者将原问题的约束方程组化成具有标准基的形式，或者提供信息，表明原问题没有可行解. 第二阶段，利用第一阶段所得的标准基，对原问题求解.

2.4.2.1 人工变量的引入

设原问题为

$$
(LP)_1: \quad
\begin{aligned}
\min \quad & Z = cx. \\
\text{s.t.} \quad & Ax = b, \\
& x \geqslant 0;
\end{aligned}
$$

引入人工变量 $y_1, \cdots, y_m$，构造新规划

$$
(LP)_2: \quad
\begin{aligned}
\min \quad & W = y_1 + y_2 + \cdots + y_m, \\
\text{s.t.} \quad & Iy + Ax = b, \\
& y \geqslant 0, x \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

其中，$y = (y_1, \cdots, y_m)^T$.

易知，新规划$(LP)_2$具有以下三个特点：

(1) $(LP)_2$ 存在可行解，例如取 $y = b, x = 0$，就得到一个可行解.

(2) $(LP)_2$ 必有最优解. 这是因为$(LP)_2$ 有可行解，且 y_i 非负，故$(LP)_2$ 的最小值有界，不会小于零.

(3) $(LP)_2$ 存在一个标准基.

基于以上几点，可以用单纯形法求解$(LP)_2$，设其最优单纯形法为表 2.13. 表 2.13 中，σ_{yi}是人工变量 y_i 对应的检验数，$d_{ij}{}'$是人工变量 y_i 的系数.

显然，所有的检验数 σ_{yi}，σ_j 都非负，且由于 $-\eta^*$ 是最优值，故必有

$$\eta^* \leqslant 0.$$

若 $\eta^*<0$，则可断言原问题 $(LP)_1$ 没有可行解．因为假如 $(LP)_1$ 有可行解 $\bar{x}$，则有

$$A\bar{x} = b, \bar{x} \geqslant 0,$$

那么，$(0,\bar{x})$ 则是 $(LP)_2$ 的一个可行解，且对应的目标值为

$$\overline{W} = 0 \geqslant -\eta^*,$$

这与假设相矛盾．

表 2.13

y_1	$\cdots$	y_m	x_1	$\cdots$	x_n	b
d'_{11}	$\cdots$	d'_{1m}	a'_{11}	$\cdots$	a'_{1n}	b'_1
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
d'_{m1}	$\cdots$	d'_{mm}	a'_{m1}	$\cdots$	a'_{mn}	b'_m
σ_{y1}	$\cdots$	σ_{ym}	σ_1	$\cdots$	σ_n	η^*

例 2.11　求解线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = -3x_1 + 2x_2, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 \leqslant 1, \\ & 2x_1 + 3x_2 \geqslant 6, \\ & x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0. \end{aligned}$$

将原问题标准化，再引入人工变量 y，构造新规划：

$$\begin{aligned} \min \quad & W = y, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ & y + 2x_1 + 3x_2 - x_4 = 6, \\ & y \geqslant 0, x_1, x_2, x_3, x_4 \geqslant 0. \end{aligned}$$

其求解过程及结果见表 2.14．

表 2.14

c_j	1	0	0	0	0	
	y	x_1	x_2	x_3	x_4	1
初始表	0	1	(1)	1	0	1
	1	2	3	0	-1	6
	0	-2	-3	0	1	-6
最优表	0	1	1	1	0	1
	1	-1	0	-3	-1	3
	0	1	0	3	1	-3

由表 2.14 可以看出，$\eta^*=-3<0$，表明原问题无可行解．事实上，容易验证，当 x_1，x_2 均非负时，原问题的两个不等式约束是互不相容的．

若 $\eta^*=0$，注意目标函数的表达式，可知必有 y_i 全为 0，可分两种情形讨论．

(1) 人工变量 y_i 全部是非基变量．不失一般性，可设 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 是基变量，则表2.13等价于方程组

$$\begin{cases} x_1 + a'_{1,m+1}x_{m+1} + \cdots + a'_{1,n}x_n = b'_1, \\ x_2 + a'_{2,m+1}x_{m+1} + \cdots + a'_{m,n}x_n = b'_2, \\ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_m + a'_{m,m+1}x_{m+1} + \cdots + a'_{m,n}x_n = b'_m. \end{cases}$$

对线性规划的可行域而言，单纯形法实质上是进行同解变换. 因而上述方程组与原问题$(LP)_1$的约束方程组的解集相同，且由于已有一个标准基，故可用它取代原问题$(LP)_1$的约束方程组，再利用上节的单纯形法求解.

(2) 某个人工变量 y_s 还是基变量. 这时，显然有

$$b'_s = y_s = 0.$$

表 2.13 中第 s 行等价于方程

$$\sum_{i=1}^{m} d'_{si}y_i + \sum_{j=1}^{n} a'_{sj}x_j = b'_s = 0. \tag{2.4.1}$$

对(2.4.1)可分两种情形进行讨论：

① (2.4.1)中所有的 a'_{sj}均为零. 注意到所有的 y_i 都为零. (2.4.1)实际上是恒等式

$$0 = 0,$$

说明表 2.13 的第 s 行是多余的、无意义的，应从表 2.13 中删除，约束方程减为 $m-1$ 个，最优表中出现一个 $m-1$ 阶的单位矩阵，正好可作为初始标准基.

② (2.4.1)中的 a'_{sj}不全为零，例如某个 a'_{sk}非零. 则可用 a'_{sk}为主元，进行换基迭代，变量 x_{sk}入基，而人工变量 y_s 出基. 由于有

$$b'_s = 0.$$

此时将产生一个退化的基可行解.

2.4.2.2　两阶段单纯形法的步骤

(1) 第一阶段，首先将原问题标准化，得到$(LP)_1$形式，再引入必要的人工变量 y_i，构造新的线性规划$(LP)_2$，并用单纯形法解新规划$(LP)_2$，得到形如表 2.13 的最优单纯形表. 若该表中 $\eta^* < 0$，表明原问题没有可行解，应停止计算；若 $\eta^* = 0$ 表明已将原问题的约束方程组变换成了含有标准基的同解方程组，转(2).

(2) 第二阶段，用第一阶段所含有标准基的约束方程组取代原问题的约束方程组，再用单纯形法求解.

例 2.12　试用两阶段单纯形法求解：

$$\begin{aligned} \min\quad & Z = x_1 - x_2 + 3x_3, \\ \text{s.t.}\quad & 2x_1 + x_2 = 4, \\ & 1.5x_1 + x_2 + x_3 = 7, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3. \end{aligned}$$

解　第一阶段，由于原问题只有两个约束，且系数矩阵又有一个单位向量，故只需再引入一个人工变量 y 就可获得单位矩阵，构造新规划如下：

$$\begin{aligned} \min\quad & W = y, \\ \text{s.t.}\quad & y + 2x_1 + x_2 = 4, \\ & 1.5x_1 + x_2 + x_3 = 7, \\ & y \geqslant 0, x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3. \end{aligned}$$

本阶段的计算过程及结果见表2.15，在表2.15中，$\eta^*=0$，人工变量为非基变量，原问题已得到标准基(x_1, x_3).

表2.15

c_j	1	0	0	0	
	y	x_1	x_2	x_3	b
初始表	1	(2)	1	0	4
	0	1.5	1	1	7
	0	-2	-1	0	-4
最优表	0.5	1	0.5	0	2
	-0.75	0	0.25	1	4
	1	0	0	0	0

第二阶段，去掉第一阶段结果中的人工变量 y，剩余部分用以替换原问题的约束方程组，则可得原问题的等价形式为

$$
\begin{aligned}
\min\quad & Z = x_1 - x_2 + 3x_3, \\
\text{s.t.}\quad & x_1 + 0.5x_2 = 2, \\
& 0.25x_2 + x_3 = 4, \\
& x_j \geqslant 0,\quad j = 1,2,3.
\end{aligned}
$$

用单纯形法求解，其过程及结果见表2.16. 由表2.16可以知道，原问题的最优解为

$$\bar{x} = (0,4,3)^{\mathrm{T}},$$

最优值为 $\bar{Z} = -(-5) = 5$.

表2.16

c_j	1	-1	3	
	x_1	x_2	x_3	b
初始表	1	(0.5)	0	2
	0	0.25	1	4
	0	-2.25	0	-14
最优解	2	1	0	4
	-0.5	0	1	3
	4.5	0	0	-5

例2.13 求解线性规划

$$
\begin{aligned}
\max\quad & Z = -x_1 + x_2 - 3x_3, \\
\text{s.t.}\quad & 4x_1 + 2x_2 = 8, \\
& 2x_1 + x_2 = 4, \\
& 1.5x_1 + x_2 + x_3 = 7, \\
& x_j \geqslant 0,\quad j = 1,2,3.
\end{aligned}
$$

注意前两个约束实际是同一约束，试观察多余约束是如何在迭代计算过程中被除去的.

引入人工变量 y_1, y_2，构造新规划为

$$\begin{aligned}\min \quad & W = y_1 + y_2, \\ \text{s.t.} \quad & y_1 + \qquad 4x_1 + 2x_2 = 8, \\ & \qquad y_2 + 2x_1 + \ \ x_2 = 4, \\ & \qquad\quad 1.5x_1 + \ \ x_2 + x_3 = 7.\end{aligned}$$

其计算过程及结果见表 2.17. 在表 2.17 中, $\eta^* = 0$，且行中，x_j 的系数以及 b'_2 全为零，故原问题的约束方程组等价于：

$$\begin{cases} x_1 + 0.5x_2 \qquad = 2, \\ \qquad 0.25x_2 + x_3 = 4. \end{cases}$$

与例 2.12 第一阶段的最后结果完全相同. 转入第二阶段后，其过程与结果也应与表 2.16 相同.

表 2.17

c_j	1	1	0	0	0	
	y_1	y_2	x_1	x_2	x_3	b
初始表	1	0	(4)	2	0	8
	0	1	2	1	0	4
	0	0	1.5	1	1	7
	0	0	−6	−3	0	−12
最优解	0.25	0	1	0.5	0	2
	−0.5	1	0	0	0	0
	−0.375	0	0	0.25	1	4
	1.5	0	0	0	0	0

2.5 改进单纯形法

从前面的介绍可以看出，求解线性规划的单纯形算法中，关键是寻找当前的可行基 $\boldsymbol{B}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{B}^{-1}$. 如果已得到 $\boldsymbol{B}^{-1}$，就可以计算出当前基 $\boldsymbol{B}$ 对应的基可行解，即

$$\boldsymbol{x}_B = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}_N = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \geqslant \boldsymbol{0},$$

且可以计算出对应的检验数

$$\sigma_j = c_j - \boldsymbol{c}_B\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{P}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, n.$$

从而可以检验当前的基可行解是否为最优解. 如果不是最优，则需寻找下一个基可行解，其关键仍是寻找下一个可行基 $\bar{\boldsymbol{B}}$ 的逆 $\bar{\boldsymbol{B}}^{-1}$. 在 2.3 节中，通过确定入基变量和出基变量来确定新基 $\bar{\boldsymbol{B}}$，然后对整个单纯形表作关于行的初等变换而得到 $\bar{\boldsymbol{B}}^{-1}$. 这一过程本质上是通过 $\bar{\boldsymbol{B}}$ 求 $\bar{\boldsymbol{B}}^{-1}$，其工作量是很大的. 而且，在求逆过程中，非基向量的数据也要全部重新计算并将新数据贮存起来，以备下一次迭代使用. 实际上，关键是确定哪些变量为基变量，然后利用原始数据 $\boldsymbol{P}_j$ 就可以计算出检验数，确定出基变量和入基变量. 因此，可由当前的可行基的逆 $\boldsymbol{B}^{-1}$ 直接求出新的可行基 $\bar{\boldsymbol{B}}$ 的逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{B}}^{-1}$.

2.5.1 $\boldsymbol{B}^{-1}$ 与 $\bar{\boldsymbol{B}}^{-1}$ 的关系

设当前可行基为

$$B=(P_1,P_2,\cdots,P_m),$$
新的可行基为 $\bar{B}$. 由于 $\bar{B}$ 与 B 只相差一个列向量，不失一般性，可设 $x_t(t\leqslant m)$ 为出基变量，$x_k(k>m)$ 为入基变量，即

$$\bar{B}=(P_1,P_2,\cdots,P_{t-1},P_k,P_{t+1},\cdots,P_m).$$

注意到

$$I=B^{-1}B=B^{-1}(P_1,\cdots,P_m)=(B^{-1}P_1,\cdots,B^{-1}P_m),$$

所以
$$B^{-1}P_i=e_i,\quad i=1,2,\cdots,m.$$
其中，e_i 是 m 维单位向量，其第 i 分量为 1，其余分量为 0，因此

$$B^{-1}\bar{B}=B^{-1}(P_1,\cdots,P_{t-1},P_k,P_{t+1},\cdots,P_m)=(e_1,\cdots,e_{t-1},B^{-1}P_k,e_{t+1},\cdots,e_m).$$

若记 $v=B^{-1}P_k$，则有

$$B^{-1}\bar{B}=(e_1,\cdots,e_{t-1},v,e_{t+1},\cdots,e_m). \tag{2.5.1}$$

由于 e_i 均为单位向量，必有

$$(B^{-1}\bar{B})^{-1}=(e_1,\cdots,e_{t-1},u,e_{t+1},\cdots,e_m). \tag{2.5.2}$$

其中，$u=(u_1,u_2,\cdots,u_m)^{\mathrm{T}}$，且

$$u_i=\begin{cases}-v_i/v_t, & i\neq t,\\ 1/v_t, & i=t.\end{cases} \tag{2.5.3}$$

其中，v_i 是 v 的分量.

记
$$M=(B^{-1}\bar{B})^{-1},$$
则 M 很容易由(2.5.2)和(2.5.3)算出，且有

$$M=\bar{B}^{-1}B,$$

故
$$\bar{B}^{-1}=MB^{-1}. \tag{2.5.4}$$
由于通常取初始可行基为单位矩阵 I，因而很容易算出新的可行基 $\bar{B}$ 的逆矩阵 $\bar{B}^{-1}$.

2.5.2 改进单纯形法的算法步骤

本算法是针对具有初始标准基的标准形式的线性规划而设计的，若所讨论的问题没有初始标准基，可引入人工变量，按上节的办法构造出含初始标准基的新规划，再利用本算法求解.改进单纯形法的步骤如下.

设初始标准基为

$$I=(P_{t_1},P_{t_2},\cdots,P_{t_m}).$$

(1) 令 $B^{-1}=I,x_B=b$.

(2) 计算单纯形乘子 $\omega=c_BB^{-1}$，对 $j=1,2,3,\cdots,n,j\neq i$，计算检验数

$$\sigma_j=c_j-\omega P_j,$$

若所有 $\sigma_j\geqslant 0$，停止计算，此时已得最优解 $\bar{x}$，其分量为

$$\begin{cases}\bar{x}_{t_i}=b_i, & i=1,2,\cdots,m,\\ \bar{x}_i=0, & i\neq t_i,\end{cases}$$

当出现负检验数 $\sigma_k(k\neq t_i)$时，转(3).

(3) 计算：$v=B^{-1}P_k$. 若 v 无正分量，表明原问题无最优解，停止计算；若 v 有正分量，表明 x_k 是入基变量，转(4).

(4) 计算 x_B 与 v 的对应正分量的比值，记最小比值者所对应的下标为 l，更换基向量序号：

$$t_l = k.$$

(5) 按(2.5.2)和(2.5.3)计算矩阵 M.

(6) 令 $B^{-1}=MB^{-1}$, $x_B=Mx_B$, 转(2).

2.5.3 改进单纯形法的特点

在单纯形法中，新的单纯形表是由上一个单纯形表迭代而来的，因而必须将每次迭代所得到的单纯形表都贮存起来，以供计算下一个单纯形表. 而在本算法中，每次计算是根据原始数据进行的，因而只需贮存原始数据就可以了，大大节省了计算机的贮存量. 其次，普通单纯形法每次均需对整个单纯形表的每个列向量进行计算，而本算法每次只处理非基变量的检验数及一个列向量(入基向量)，计算量相对较少.

综上所述，可知本算法特别适用于大型线性规划的求解.

例 2.14 用改进单纯形法求解：

$$\begin{aligned}
\min\quad & Z = -6x_1 + 2x_2 - 3x_3,\\
\text{s.t.}\quad & 2x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 \quad = 2,\\
& x_1 + \qquad 4x_3 + \quad x_5 = 4,\\
& x_j \geqslant 0,\quad j = 1,2,3,4,5.
\end{aligned}$$

解

$$A = (P_1, P_2, P_3, P_4, P_5) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 4 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$b = (2,4)^T, c = (-6, 2, -3, 0, 0).$$

(1) 第一次迭代：

$B=(P_4, P_5)=I$, $B^{-1}=I$, 即

$$t_1 = 4, t_2 = 5, c_B = (c_4, c_5) = (0,0),$$

$$x_B = (x_{t_1}, x_{t_2})^T = b = (2,4)^T,$$

$$\omega = c_B B^{-1} = (0,0),$$

且 $\sigma_1 = c_1 - \omega P_1 = -6<0$, $k=1$, P_1 入基,

$$v = B^{-1}P_1 = (2,1)^T,$$

$$\min\{x_{t_1}/v_1, x_{t_2}/v_2\} = \min\{2/2, 4/1\} = x_{t_1}/v_1$$

表明, x_{t_1} 即 x_4 出基. 改记

$$t_1 = 1,$$

$$M = \begin{pmatrix} 1/v_1 & 0 \\ -v_2/v_1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B^{-1} \leftarrow MB^{-1} = MI = M,$$

$$x_B \leftarrow B^{-1}b = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix},$$

(2) 第二次迭代($t_1=1$, $t_2=5$):

$$\omega = c_B B^{-1} = (c_1, c_5) B^{-1} = (-6,0)\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix} = (-3,0),$$

$$\sigma_2 = c_2 - \omega P_2 = 2 - (-3,0)\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -1 < 0, x_2 \text{入基},$$

$$v = B^{-1}P_2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix},$$

v 只有一个正分量 v_2，故 x_{t_2}(即 x_5)出基，

$$t_2 = 2,$$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -v_1/v_2 \\ 0 & 1/v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$B^{-1} \leftarrow MB^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

$$x_B \leftarrow B^{-1}b = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

(3) 第三次迭代($t_1=1, t_2=2$)：

$$\omega = c_B B^{-1} = (c_1, c_2) B^{-1} = (-6,2)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} = (-2, -2),$$

$$\sigma_3 = c_3 - \omega P_3 = -3 - (-2, -2)(2,4)^T = 9 > 0,$$

$$\sigma_4 = c_4 - \omega P_4 = 0 - (-2, -2)(1,0)^T = 2 > 0,$$

$$\sigma_5 = c_5 - \omega P_5 = 0 - (-2, -2)(0,1)^T = 2 > 0,$$

所有检验数都非负，已达最优，则最优解为

$$\bar{x} = (4,6,0,0,0)^T,$$

最优值为 $\bar{Z} = c_B x_B = -12.$

2.6 对偶问题

每一个线性规划问题，都有一个被称为对偶的线性规划问题与之相对应，两者之间有密切的联系．因为它们可以看作对同一个问题从不同角度所进行的分析和研究．它们是根据同样的条件和数据构成的两个不同的问题．一个是求目标函数的最小值，另一个是求目标函数的最大值，它们之间存在着内在的关系．

2.6.1 对偶问题的表达

线性规划中的对偶可以概括为三种形式．

(1) 对称形式的对偶

对称形式的对偶定义如下．

原问题(primal problem)：

$$\left.\begin{aligned} \min\ & cx, \\ \text{s.t.}\ & Ax \geqslant b, \\ & x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.6.1}$$

其对偶问题(dual problem)：

$$\left.\begin{aligned} \max \quad & \boldsymbol{\omega b}, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{\omega A} \leqslant \boldsymbol{c}, \\ & \boldsymbol{\omega} \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.6.2}$$

其中，$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{P}_1,\cdots,\boldsymbol{P}_n)$是 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{b}=(b_1,\cdots,b_m)^{\mathrm{T}}$ 是 m 维列向量，$\boldsymbol{c}=(c_1,\cdots,c_n)$是 n 维行向量. $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 是由原问题的变量组成的 n 维列向量，$\boldsymbol{\omega}=(\omega_1,\cdots,\omega_m)$是由对偶问题的变量组成的 m 维行向量.

在原问题(2.6.1)中，目标函数是 $\boldsymbol{c}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 的内积，$\boldsymbol{Ax}\geqslant\boldsymbol{b}$ 包含 m 个不等式约束，其中每个约束条件记作

$$\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x} \geqslant b_i.$$

其中，$\boldsymbol{A}_i$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行. 变量 x_j 有非负限制.

在对偶问题(2.6.2)中，目标函数是 $\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 的内积，$\boldsymbol{\omega A}\leqslant\boldsymbol{c}$ 包含 n 个不等式约束，每个约束条件记作

$$\boldsymbol{\omega p}_j \leqslant c_j,$$

对偶变量 ω_i 也有非负限制.

根据对称对偶的定义，原问题中约束条件 $\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x}\geqslant b_i$ 的个数，恰好等于对偶变量的个数；原问题中变量的个数，恰好等于对偶问题中约束条件的 $\boldsymbol{\omega p}_j\leqslant c_j$ 的个数.

按照上述定义，很容易写出一个线性规划问题的对偶问题.

例 2.15 设原问题是

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 - x_2, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + \ \ x_2 \geqslant 5, \\ & x_1 - 2x_2 \geqslant 1, \\ & x_1, \quad x_2 \geqslant 0. \end{aligned}$$

那么，上述问题的对偶问题就是

$$\begin{aligned} \max \quad & 5\omega_1 + \omega_2, \\ \text{s.t.} \quad & \omega_1 + \ \ \omega_2 \leqslant 1, \\ & \omega_1 - 2\omega_2 \leqslant -1, \\ & \omega_1, \quad \omega_2 \geqslant 0. \end{aligned}$$

(2) 非对称形式的对偶

考虑具有等式约束的线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \boldsymbol{cx}, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{x} \geqslant 0. \end{aligned} \tag{2.6.3}$$

为了利用对称对偶的定义给出(2.6.3)的对偶问题，先把(2.6.3)写成等价形式：

$$\begin{aligned} \min \quad & \boldsymbol{cx}, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} \geqslant \boldsymbol{b}, \\ & -\boldsymbol{Ax} \geqslant -\boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{x} \geqslant 0. \end{aligned}$$

即
$$\left.\begin{aligned} &\min \quad cx, \\ &\text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} A \\ -A \end{pmatrix} x \geqslant \begin{pmatrix} b \\ -b \end{pmatrix}, \\ &\qquad x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.6.4}$$
根据对称对偶的定义,(2.6.4)的对偶问题是
$$\begin{aligned} &\max \quad ub - vb, \\ &\text{s.t.} \quad uA - vA \leqslant c, \\ &\qquad u,\ v \geqslant 0. \end{aligned}$$
令 $\omega = u - v$,显然 ω 没有非负限制,于是得
$$\begin{aligned} &\max \quad \omega b, \\ &\text{s.t.} \quad \omega A \leqslant c. \end{aligned} \tag{2.6.5}$$
定义(2.6.5)为(2.6.3)的对偶问题.(2.6.3)和(2.6.5)构成的对偶与对称对偶不同,前者原问题中有 m 个等式约束,而对偶问题中 m 个变量无正负号限制,它们称为非对称对偶.

例 2.16 给定原问题:
$$\begin{aligned} &\min \quad 5x_1 + 4x_2 + 3x_3, \\ &\text{s.t.} \quad x_1 + x_2 + x_3 = 4, \\ &\qquad 3x_1 + 2x_2 + x_3 = 5 \\ &\qquad x_1,\ x_2,\ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$
它的对偶问题是
$$\begin{aligned} &\max \quad 4\omega_1 + 5\omega_2, \\ &\text{s.t.} \quad \omega_1 + 3\omega_2 \leqslant 5, \\ &\qquad \omega_1 + 2\omega_2 \leqslant 4, \\ &\qquad \omega_1 + \omega_2 \leqslant 3, \\ &\qquad \omega_1, \omega_2 \text{ 无限制}. \end{aligned}$$

(3) 一般情形

实践中有许多线性规划问题同时含有"$\geqslant$","$\leqslant$"及"$=$"型约束条件.下面定义这类线性规划问题的对偶问题.

设原问题是
$$\left.\begin{aligned} &\min \quad cx, \\ &\text{s.t.} \quad A_1 x \geqslant b_1, \\ &\qquad A_2 x = b_2, \\ &\qquad A_3 x \leqslant b_3, \\ &\qquad x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.6.6}$$
其中,A_1 是 $m_1 \times n$ 矩阵,A_2 是 $m_2 \times n$ 矩阵,A_3 是 $m_3 \times n$ 矩阵,b_1,b_2 和 b_3 分别是 m_1 维,m_2 维和 m_3 维列向量,c 是 n 维行向量,x 是 n 维列向量.

现在,利用非对称对偶的表达式(2.6.3)和(2.6.5)给出(2.6.6)的对偶.为此先引入松弛变量,把(2.6.6)写成等价形式:

$$
\begin{aligned}
\min \quad & cx, \\
\text{s.t.} \quad & A_1x - x_s = b_1, \\
& A_2x = b_2, \\
& A_3x + x_t = b_3, \\
& x, x_s, x_t \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

其中,x_s 是由 m_1 个松弛变量组成的 m_1 维列向量,x_t 是由 m_3 个松弛变量组成的 m_3 维列向量.上述问题即

$$
\left.
\begin{aligned}
\min \quad & cx + 0 \cdot x_s + 0 \cdot x_t, \\
\text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} A_1 & -I_{m_1} & 0 \\ A_2 & 0 & 0 \\ A_3 & 0 & I_{m_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ x_s \\ x_t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}, \\
& x, x_s, x_t \geqslant 0.
\end{aligned}
\right\} \tag{2.6.7}
$$

按照非对称对偶的定义,(2.6.7)的对偶问题是

$$
\begin{aligned}
\max \quad & \omega_1 b_1 + \omega_2 b_2 + \omega_3 b_3 \\
\text{s.t.} \quad & (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \begin{bmatrix} A_1 & -I_{m_1} & 0 \\ A_2 & 0 & 0 \\ A_3 & 0 & I_{m_3} \end{bmatrix} \leqslant [c, 0, 0],
\end{aligned}
$$

即

$$
\begin{aligned}
\max \quad & \omega_1 b_1 + \omega_2 b_2 + \omega_3 b_3, \\
\text{s.t.} \quad & \omega_1 A_1 + \omega_2 A_2 + \omega_3 A_3 \leqslant c, \\
& \omega_1 \geqslant 0, \\
& \omega_2 \text{ 无限制}, \\
& \omega_3 \leqslant 0.
\end{aligned} \tag{2.6.8}
$$

其中,ω_1,ω_2 和 ω_3 分别是由变量组成的 m_1 维,m_2 维和 m_3 维行向量.定义(2.6.8)为(2.6.6)的对偶问题.

由(2.6.8)可知,原问题中的约束 $A_1x \geqslant b_1$ 所对应的对偶变量 ω_1 有非负限制,$A_2x = b_2$ 所对应的对偶变量 ω_2 无正负限制,$A_3x \leqslant b_3$ 所对应的对偶变量 ω_3 有非正限制.

上述三种形式的对偶中,原问题和对偶问题是相对的.由于原问题的对偶问题也是线性规划,也有对偶问题,容易验证,它的对偶问题就是原来对偶中的原问题.因此,相互对偶的两个问题中,任何一个问题均可作为原问题,而把另一个作为对偶问题.

根据以上分析,可以总结出构成对偶规划的一般规则.为叙述方便,在下面所说的约束均指

$$
\begin{aligned}
A_i x \geqslant b_i \ \text{及}\ & \omega p_j \leqslant c_j \\
(=) \qquad & \quad (=) \\
(\leqslant) \qquad & \quad (\geqslant)
\end{aligned}
$$

型约束,不包含变量非负或非正限制.这些规则是:

(1) 若原问题是极大化问题,那么对偶问题就是极小化问题;若原问题是极小化问题,那么对偶问题就是极大化问题.

(2) 在原问题和对偶问题中,约束右端资源向量与目标函数中价格向量恰好对换.

(3) 对于极小化问题的"≥"型约束(极大化问题的"≥"型约束),相应的对偶变量有非负限制;对于极小化问题的"≤"型约束(极大化问题的"≥"型约束),相应的对偶变量有非正限制;对于正限制;对于原问题的"="型约束,相应的对偶变量无正负限制.

(4) 对于极小化问题的具有非负限制的变量(极大化问题的具有非正限制的变量),在其对偶问题中,相应的约束为"≤"型不等式;对于极小化问题的具有非正限制的变量(极大化问题具有非负限制的变量),在其对偶问题中,相应的约束为"≥"不等式;对于原问题中无正负限制的变量,在其对偶问题中,相应的约束为等式.

例 2.17 写出下列线性规划问题的对偶问题:

$$\left.\begin{aligned} \max \quad & -x_1 + x_2 + x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 + 2x_3 \leqslant 25, \\ & -x_1 + 2x_2 - x_3 \geqslant 2, \\ & x_1 - x_2 + x_3 = 3, \\ & x_1, \quad x_2 \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.6.9}$$

在原问题中,有

$$\boldsymbol{c} = (c_1, c_2, c_3) = (-1, 1, 1),$$

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2, \boldsymbol{P}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix},$$

根据规则 1 和 2,对偶问题应为极小化 $\boldsymbol{\omega b}$,根据规则 4,在对偶问题中,与 x_1, x_2 对应的约束应是"≥"型不等式,它们是

$$\boldsymbol{\omega P}_1 \geqslant c_1$$

及

$$\boldsymbol{\omega P}_2 \geqslant c_2.$$

与 x_3 对应的约束是等式,即

$$\boldsymbol{\omega P}_3 = c_3.$$

根据规则 3,与原问题(2.6.9)的第 1 个约束对应的对偶变量 $\omega_1 \geqslant 0$,与第 2 个约束对应的对偶变量 $\omega_2 \leqslant 0$,与第 3 个约束对应的对偶变量 ω_3 无正负限制.因此(2.6.9)的对偶问题是

$$\begin{aligned} \min \quad & 25\omega_1 + 2\omega_2 + 3\omega_3, \\ \text{s.t.} \quad & \omega_1 - \omega_2 + \omega_3 \geqslant -1, \\ & \omega_1 + 2\omega_2 - \omega_3 \geqslant 1, \\ & 2\omega_1 - \omega_2 + \omega_3 = 1, \\ & \omega_1 \geqslant 0, \omega_2 \leqslant 0. \end{aligned}$$

2.6.2 对偶问题的基本性质

定理 2.15 弱对偶定理 设 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{\omega}^{(0)}$ 分别是(2.6.1)和(2.6.2)的可行解,则 $\boldsymbol{c}\boldsymbol{x}^{(0)} \geqslant \boldsymbol{\omega}^{(0)}\boldsymbol{b}$.

证明　利用对偶定义很容易得出定理的结论. 由于 $Ax^{(0)} \geqslant b$ 和 $\omega^{(0)} \geqslant 0$, 则有

$$\omega^{(0)}Ax^{(0)} \geqslant \omega^{(0)}b. \tag{2.6.10}$$

由于 $c \geqslant \omega^{(0)}A$ 和 $x^{(0)} \geqslant 0$, 则有

$$cx^{(0)} \geqslant \omega^{(0)}Ax^{(0)}. \tag{2.6.11}$$

由(2.6.10)和(2.6.11)即知 $cx^{(0)} \geqslant \omega^{(0)}b$.

上述定理表明, 就原问题和对偶问题的可行解而言, 对于对偶中的两个问题, 每一个问题的任何一个可行解处的目标函数值都给出另一个问题的目标函数值的界. 极小化问题给出极大化问题的目标函数值的上界; 极大化问题给出极小化问题的目标函数值的下界.

由定理 2.15 可以得到以下几个重要结论:

推论 1　若 $x^{(0)}$ 和 $\omega^{(0)}$ 分别是(2.6.1)和(2.6.2)的可行解, 且 $cx^{(0)} = \omega^{(0)}b$, 则 $x^{(0)}$ 和 $\omega^{(0)}$ 分别是(2.6.1)和(2.6.2)的最优解.

推论 2　对偶问题(2.6.1)和(2.6.2)有最优解的充要条件是它们同时有可行解.

推论 3　若(2.6.1)的目标函数值在可行域上无下界, 则(2.6.2)无可行解; 反之, 若(2.6.2)的目标函数值在可行域上无上界, 则(2.6.1)无可行解.

定理 2.16　主对偶定理　如果原问题(2.6.1)与对偶问题(2.6.2)都有可行解, 那么, 两者必都有最优解, 且两者的最优值相等.

证明　首先, 证明原问题有最优解. 由于已知存在可行解, 若原问题没有最优解, 则意味着原问题可行解的值可以趋于 $-\infty$. 设对偶问题的一个可行解为 $\omega^{(0)}$, 则由弱对偶定理, 应有 $\omega^{(0)}b \leqslant -\infty$, 显然不可能. 因而原问题必有最优解. 其次, 证明对偶问题也有最优解, 且两者的最优值相等. 原问题的标准形式为

$$\begin{aligned}
\min \quad & (c, 0)\begin{pmatrix} x \\ x_s \end{pmatrix}, \\
\text{s.t.} \quad & (A, -I)\begin{pmatrix} x \\ x_s \end{pmatrix} = b, \\
& x \geqslant 0, x_s \geqslant 0.
\end{aligned}$$

必存在基可行解 $(\bar{x}, \bar{x}_s)$ 是最优解.

设对应的最优基为 B, 则检验数向量为

$$\sigma = (c, 0) - c_B B^{-1}(A, -I) \geqslant 0, \tag{2.6.12}$$

记单纯形乘子为 $\bar{\omega} = c_B B^{-1}$, 由(2.6.12), 有 $\bar{\omega}A \leqslant c$, $\bar{\omega} \geqslant 0$, 表明 $\bar{\omega}$ 是对偶问题的可行解, 且其对应的目标值为

$$\bar{\omega}b = c_B B^{-1}b,$$

而原问题的最优值为　$$c\bar{x} = c_B\bar{x} = c_B B^{-1}b.$$

任取对偶问题的可行解 ω, 由弱对偶定理, 有 $\omega b \leqslant c\bar{x} = c_B B^{-1}b = \bar{\omega}b$, 表明, $\bar{\omega}$ 是对偶问题的最优解, 且原问题与对偶问题的最优解相等, 均为 $c_B B^{-1}b$.

推论 1　原问题有最优解的充要条件是对偶问题有最优解.

推论 2　若原问题有可行解, 但无最优解, 则对偶问题没有可行解.

定理 2.17　最优性准则　设 $x^{(0)}$ 和 $\omega^{(0)}$ 分别是原问题与对偶问题的可行解. 那么, $x^{(0)}$ 和 $\omega^{(0)}$ 分别是两者的最优解的充要条件是 $cx^{(0)} = \omega^{(0)}b$.

证明　由定理 2.16 知必要性成立.

充分性　任取对偶问题的可行解 ω，由已知条件，有 $\omega b \leqslant c x^{(0)} = \omega^{(0)} b$，表明 $\omega^{(0)}$ 是对偶问题的最优解.

同理，可证 $x^{(0)}$ 是原问题的最优解.

定理 2.18　若线性规划(2.6.1)存在一个对应基 B 的最优解 $x^{(0)}$，则单纯形乘子 $\omega^{(0)} = c_B B^{-1}$ 是对偶问题(2.6.2)的一个最优解.

根据这个定理，能够从原问题的最优单纯形表中直接获得对偶问题的一个最优解.

2.6.3　对偶单纯形法

在单纯形法的讨论中可以知道，寻找最优解是在基本解中进行的，基本解就是具有如下特征的点：$x = \begin{pmatrix} x_B \\ 0 \end{pmatrix}$，$x_B = B^{-1} b$，其中 B 是线性规划的一个基.

基本解成为最优解的充要条件是以下两个条件同时成立：第一，这个基本解是可行解，即满足 $B^{-1} b \geqslant 0$；第二，最优性条件满足，即检验数向量非负：$\sigma = c - c_B B^{-1} A \geqslant 0$.

在单纯形法的迭代过程中，这两个条件按以下次序得到满足：首先保证可行性，即保证 $B^{-1} b \geqslant 0$，并且在迭代过程中始终保持可行性不变；然后再逐渐使检验数向量满足 $\sigma = c - c_B B^{-1} A \geqslant 0$，即逐步使对偶可行性得到满足. 当这两条都得到满足时，也就得到了最优解.

上述过程也可以反过来进行，如果能首先保证检验数向量非负(即满足对偶可行性)，并在迭代过程中始终保持非负，然后再逐步设法使基本解满足可行性，也能得到最优解. 由于在迭代过程中始终保证对偶可行性，因此把这种求解最优解的算法称为对偶单纯形法. 对偶单纯形算法如下.

设有线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & x \geqslant 0. \end{aligned}$$

(1) 根据原问题，列出初始单纯形表，且所有的检验数非负.

(2) 若单纯形表中，b 列所有数 $b_j \geqslant 0$，则可行性满足，得到最优解，计算停止；否则，存在某个 $b_j < 0$，转(3).

(3) 若所有的 $a_{lj} \geqslant 0$，则原问题无可行解，计算停止；否则，若存在 $a_{lj} < 0$，转(4).

(4) 确定换基迭代的主元 a_{lk}，其中，行下标 l 满足：

$$b_l = \min\{b_i \mid b_i < 0\},$$

列下标 k 满足

$$\frac{\sigma_k}{a_{lk}} = \min_j \left\{ -\frac{\sigma_j}{a_{lj}} \mid a_{lj} < 0 \right\}.$$

(5) 换基迭代. 以 a_{lk} 为主元，对整个单纯形表进行换基迭代变换，得到新单纯形表，转(2).

例 2.18　用对偶单纯形法求解：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = 3x_1 + 4x_2 + 5x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + 2x_2 + 3x_3 \geqslant 5, \\ & 2x_1 + 2x_2 + x_3 \geqslant 6, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3. \end{aligned}$$

解 引入剩余变量,原问题化为

$$\min \quad Z = 3x_1 + 4x_2 + 5x_3,$$
$$\text{s.t.} \quad \begin{aligned} -x_1 - 2x_2 - 3x_3 + x_4 \quad &= -5, \\ -2x_1 - 2x_2 - x_3 + \quad x_5 &= -6, \\ x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3,4,5. \end{aligned}$$

令 $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$,则基变量为 x_4, x_5,初始单纯表见表 2.18.

表 2.18

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
-1	-2	-3	1	0	-5
(-2)	-2	-1	0	1	-6
3	4	5	0	0	0

表 2.18 中,$b_2 = -6$ 为最小负元,且有

$$\frac{\sigma_1}{a_{21}} = \min\left\{-\frac{3}{-2}, -\frac{4}{-2}, -\frac{5}{-1}\right\} = \frac{3}{2}.$$

所以,选 a_{21}为主元,换基迭代,得新单纯形表,见表 2.19。

表 2.19

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	(-1)	-5/2	1	-1/2	-2
1	1	1/2	0	-1/2	3
0	1	7/2	0	3/2	-9

表 2.19 中,$\frac{\sigma_2}{a'_{12}} = \min\left\{-\frac{1}{-1}, -\frac{7/2}{-5/2}, -\frac{3/2}{-1/2}\right\} = 1.$

换基迭代,得表 2.20.

表 2.20

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	1	5/2	-1	1/2	2
1	0	-2	1	-1	1
0	0	1	1	1	-11

这时,$\boldsymbol{x}_B = (1,2)^{\mathrm{T}} \geqslant \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{x}^* = (1,2,0,0,0)^{\mathrm{T}}$ 是可行的,因此它是原问题的最优解,最优值为 $Z^* = 11$.

在经济问题中,有许多问题用对偶单纯形法比用一般的单纯形法求解更为方便简单,例如最小费用问题,追求的目标函数为极小化,目标函数的系数全部非负,使用对偶单纯形法求解非常简单.

2.7 灵敏度分析

对于一个给定的线性规划,一个决策方案是否可行、是否最优,都依赖于构成这个线性规划模型的数据,数据变了,或约束条件有所增减,就有可能影响原最优方案的最优性甚至可行性. 而在现实生活、生产与科研中,数据大多数是统计数据或观测数据,这些数

据常常存在一定程度的随机误差与波动．因此，需要进行灵敏度分析(sensitivity analysis)，来研究数据有微小变化时最优解的反应．本节所考虑的问题仍然是

$$\left.\begin{aligned} \min \quad & cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.7.1}$$

设 B 是一个基，$x^* = (x_B^*, 0)$，显然，B 成为最优基且 x^* 成为最优解的充要条件是(2.7.2)和(2.7.3)同时成立：

$$x_B^* = B^{-1}b \geqslant 0, \tag{2.7.2}$$

$$\sigma = c - c_B B^{-1} A \geqslant 0. \tag{2.7.3}$$

因此，若已知某个数据变化后的数值，只需对新数据计算检查(2.7.2)与(2.7.3)是否仍然成立：若仍成立，则原最优基(或最优解)的最优性不变；否则，应另求新的最优解(基)．反之，若想在保持原最优解(或最优基)的条件下求出某个数据的允许变化范围，只需将该数据视为待定参数，联立求解(2.7.2)和(2.7.3)，求出该数据的范围．

2.7.1 价格系数 c_j 的变化

为简化讨论，假定除价格系数 c_j 之外，原问题的其余数据均没有变化．

假定要解决的问题是：如果要保持原最优解不变，求价格系数 c_j 的最大允许变化范围．

首先，由(2.7.2)可知，价格系数 c_j 的变化并不影响解的可行性，因此只需考虑 c_j 的变化对检验数向量 σ 的影响即可．

设价格向量由 c 变成 $\bar{c}$．

$$\bar{c} = (\bar{c}_B, \bar{c}_N).$$

其中，$\bar{c}_B$，$\bar{c}_N$ 分别是基变量向量 x_B 和非基变量向量 x_N 的价格系数，则其对应的新检验数向量 $\bar{\sigma} = \bar{c} - \bar{c}_B B^{-1} A$．

基变量向量 x_B 的检验数向量恒有

$$\bar{\sigma}_B = \bar{c}_B - \bar{c}_B B^{-1} B = 0.$$

非基变量向量 x_N 对应的检验数向量为

$$\bar{\sigma}_N = \bar{c}_N - \bar{c}_B B^{-1} N. \tag{2.7.4}$$

欲使原最优解不变，只需令 $\bar{\sigma}_N \geqslant 0$ 即可，即令

$$\bar{c}_N - \bar{c}_B B^{-1} N \geqslant 0, \tag{2.7.5}$$

从不等式组(2.7.5)中解出 $\bar{c}_B, \bar{c}_N$ 的解集就达到了目的．特别地，有

(1) 若基变量价格系数不变(即 $\bar{c}_B = c_B$)，而非基变量价格系数变为

$$\bar{c}_N = c_N + \Delta c_N,$$

则(2.7.5)化为

$$(c_N + \Delta c_N) - c_B B^{-1} N \geqslant 0,$$

$$\Delta c_N \geqslant -(c_N - c_B B^{-1} N) = -\sigma_N,$$

表明，当仅有非基变量的价格系数变化时，为保持原最优解不变，其变化量 Δc_j 不能小于原问题的对应检验数 σ_j 的相反数 $-\sigma_j$。

(2) 若非基变量价格系数不变(即 $\bar{c}_N = c_N$)，而基变量的价格系数为 $\bar{c}_B = c_B + \Delta c_B$，则

(2.7.5)化为

$$c_N-(c_B+\Delta c_B)B^{-1}N\geqslant 0,$$
$$\Delta c_B B^{-1}N\leqslant c_N-c_B B^{-1}N=\sigma_N,$$

注意 $B^{-1}N$ 就是最优表中非基变量的系数矩阵 N'，所以应有

$$\Delta c_B N'\leqslant\sigma_N, \tag{2.7.6}$$

从(2.7.6)中解出 Δc_B 的各个分量即可。

2.7.2 资源约束向量 b 的变化

假定原问题的约束方程组右端的资源约束向量 b 变为

$$\bar{b}=b+\Delta b,$$

而原问题其余的数据不变。

为使最优基可行解的意义更加明确直观，不妨假定原问题是一个求最大收益的最优生产计划问题，这样，最优解 x^* 即代表一个最优生产计划．最优基可行解代表了两重意义，一是可知道哪些变量是基变量(其经济意义是应安排哪些品种的产品投产)，二是各个基变量的值是多少(其经济意义是准备投产的品种各应生产多少数量)．因此，最优解不变就意味着既要最优基 B 不变，又要基变量的值 x_B 不变，但是由于

$$x_B=B^{-1}b,$$

即使最优基 B 不变，b 的变化也必引起 x_B 的值变化．因而当 b 发生变化时，只讨论最优基是否变化．由于在生产实践中，改变生产的品种往往要增加许多费用，因此，当资源向量 b 变化时，如果能保持最优基不变，也是很有意义的．

设讨论的问题为：如果欲保持原问题的最优基不变，那么，资源约束向量 b 的最大允许变化范围是什么？

由(2.7.3)，检验数 σ 的计算与 b 无关，因而只需讨论对于变化后的 $\bar{b}$，是否仍有 $\bar{x}_B\geqslant 0$ 即可．令

$$\bar{x}_B\geqslant 0,$$
$$B^{-1}(b+\Delta b)=B^{-1}\bar{b}\geqslant 0,$$
$$B^{-1}\Delta b\geqslant -B^{-1}b=-b'. \tag{2.7.7}$$

其中，b' 是最优表中 b 列的向量．从(2.7.7)中解出 Δb 的各分量的取值范围，问题即得到解决．

欲求解(2.7.7)，关键是求出 B^{-1}．从理论上讲，既然已经知道了最优基 B，就可以采用线性代数中求矩阵的逆矩阵的方法算出 B^{-1}．但是现在没有必要花费大量精力计算逆矩阵，事实上，最优单纯形表中已经提供了有关 B^{-1} 的信息．

设原问题的初始标准基为

$$B_0=I=(P_{t_1},P_{t_2},\cdots,P_{t_m}).$$

其中，向量 P_{t_i} 是单位坐标向量 e_i，是原问题的约束方程中变量 x_{t_i} 所对应的系数列向量．

已知 B 是最优基，由单纯形法的迭代过程知，最优单纯形表中的系数矩阵各列应为

$$A'=(P'_1,P'_2,\cdots,P'_n)=B^{-1}A=(B^{-1}P_1,B^{-1}P_2,\cdots,B^{-1}P_n). \tag{2.7.8}$$

因此，最优表中变量 x_{t_i} 对应的列向量 P'_{t_i} 满足

$$(P'_{t_1},P'_{t_2},\cdots,P'_{t_m})=(B^{-1}P_{t_1},B^{-1}P_{t_2},\cdots,B^{-1}P_{t_m})$$

$$= B^{-1}(P_{t_1}, P_{t_2}, \cdots, P_{t_m}) = B^{-1}I, \tag{2.7.9}$$

所以有

$$(P'_{t_1}, P'_{t_2}, \cdots, P'_{t_m}) = B^{-1}.$$

2.7.3 约束方程组的系数矩阵 A 的变化

这里,仅对非基向量 P_j 发生变化的情形进行讨论.由(2.7.2)和(2.7.3)可知,非基向量 P_j 的变化仅仅影响相应的检验数 σ_j 的值,而对解的可行性没有影响.设非基向量 P_j 变为

$$\overline{P}_j = P_j + \Delta P_j.$$

对应的检验数为 $\bar{\sigma}_j$,那么有

$$\bar{\sigma}_j = c_j - c_B B^{-1}\overline{P}_j = c_j - c_B B^{-1}(P_j + \Delta P_j).$$

显然,欲保持最优解不变,必须且只需使 $\bar{\sigma}_j$ 非负.为此,令

$$\bar{\sigma}_j \geqslant 0,$$

$$c_j - c_B B^{-1}(P_j + \Delta P_j) \geqslant 0,$$

$$c_B B^{-1}\Delta P_j \leqslant c_j - c_B B^{-1}P_j = \sigma_j, \tag{2.7.10}$$

求解不等式(2.7.10),即可确定 P_j 的变化范围.

2.7.4 增加一个变量 x_{n+1}

设原问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = c_B x_B + c_N x_N, \\ \text{s.t.} \quad & B x_B + N x_N = b, \\ & x_B \geqslant 0, x_N \geqslant 0. \end{aligned}$$

其中,B 是原问题的一个可行基.

在原问题中增加一个变量 x_{n+1}(其经济意义是在制定最优生产计划时,增加一个可以考虑的新产品 A_{n+1}),化为新问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & Z' = c_B x_B + c_N x_N + c_{n+1} x_{n+1}, \\ \text{s.t.} \quad & B x_B + N x_N + P_{n+1} x_{n+1} = b, \\ & x_B \geqslant 0, x_N \geqslant 0, x_{n+1} \geqslant 0. \end{aligned}$$

显然,在新问题中,B 仍然是一个基.由于在新问题中,并未改变原问题的数据 b 和 P_j, c_j.因此,在新问题中,B 仍然是一个可行基,而检验数 $\sigma_j (j = 1, 2, \cdots, n)$ 也不变.若 B 是原问题的最优基,则在新问题中,应有

$$B^{-1}b \geqslant 0,$$

$$\sigma_j \geqslant 0, \quad j = 1, 2, \cdots, n.$$

因此,若欲使 B 也是新问题的最优基,必须且只需 σ_{n+1} 非负.令

$$\sigma_{n+1} = c_{n+1} - c_B B^{-1} P_{n+1}.$$

若 $\sigma_{n+1} \geqslant 0$,表明 B 是新问题的最优基,x_{n+1} 是新问题的非基变基(其经济意义是新产品 A_{n+1} 不应投产),原问题的最优解在其后面增加一个零分量后即为新问题的最优解.

若 $\sigma_{n+1} < 0$,表明 B 不是新问题的最优基,需再次迭代.为此,应计算

$$P'_{n+1} = B^{-1}P_{n+1},$$

把 P'_{n+1} 和 σ_{n+1} 加入到原问题的最优表中,以 x_{n+1} 为入基变量,进行换基迭代,求出新的最优解.

2.7.5 增加一个约束条件

设在原问题中增加一个约束条件

$$d_1x_1 + \cdots + d_nx_n \leqslant b_{m+1},$$

引入松弛变量 x_{n+1},可化为

$$d_1x_1 + \cdots + d_nx_n + x_{n+1} = b_{m+1}.$$

于是约束方程组的系数矩阵变为 $m+1$ 行、$n+1$ 列,其增广矩阵为

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{d}_B & \boldsymbol{d}_N & 1 & \cdots & b_{m+1} \end{pmatrix}. \tag{2.7.11}$$

其中,$\boldsymbol{d}_B = (d_1, d_2, \cdots, d_m)$, $\boldsymbol{d}_N = (d_{m+1}, \cdots, d_n)$, $\boldsymbol{0} = (0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}$.

(2.7.11)等价于

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{d}_B & \boldsymbol{d}_N & 1 & \cdots & b_{m+1} \end{pmatrix}. \tag{2.7.12}$$

注意(2.7.12)的上部分恰好是原问题的最优单纯形表的系数部分.利用关于行的初等变换,将(2.7.12)中的 $\boldsymbol{d}_B$ 化为$\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{0} = (0, \cdots, 0)$,可将(2.7.12)化为(2.7.13),有

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{d}'_N & 1 & \cdots & b'_{m+1} \end{pmatrix}. \tag{2.7.13}$$

显然,(2.7.13)正是新问题的单纯形表的系数部分.对照(2.7.13)与(2.7.11)可知,新问题的基为

$$\overline{\boldsymbol{B}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{d}_B & 1 \end{pmatrix}.$$

基变量向量为 $x_B = (x_1, \cdots, x_m, x_{n+1})^{\mathrm{T}}$.

下面讨论新问题关于基 $\overline{\boldsymbol{B}}$ 的检验数向量 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$.记新问题的系数矩阵为 $\overline{\boldsymbol{A}}$,那么

$$\overline{\boldsymbol{A}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{d}_B & \boldsymbol{d}_N & 1 \end{pmatrix}, \quad \overline{\boldsymbol{A}}' = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{d}'_N & 1 \end{pmatrix}.$$

新问题的价格系数向量为

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{c}} &= (\bar{\boldsymbol{c}}_B, \bar{\boldsymbol{c}}_N, 0), \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}} &= (\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B, \bar{\boldsymbol{\sigma}}_N, \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}) \\ &= (\boldsymbol{c}_B, \boldsymbol{c}_N, 0) - (\boldsymbol{c}_B, 0)\begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{d}'_N & 1 \end{pmatrix} \\ &= (\boldsymbol{0}, \boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{c}_B\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}, 0) \\ &= (\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\sigma}_N, 0). \end{aligned}$$

显然,若 $\boldsymbol{B}$ 是原问题的最优基,则有

$$\boldsymbol{\sigma}_N \geqslant \boldsymbol{0},$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} \geqslant \boldsymbol{0}.$$

若 $b'_{m+1} \geqslant 0$,表明已得到新问题的最优单纯形表.

若 $b'_{m+1}<0$，表明新问题的基 $\bar{B}$ 不是可行基．这时，可利用对偶单纯形法进行换基迭代，求出新问题的最优解．

2.8 多项式时间算法

一个算法的计算量与每个具体线性规划的规模有关，把线性规划问题输入计算机时，全部数据化为一个二进制代码序列，其中所包含的 0 与 1 的个数 L 称为该问题的输入长度，可以用来刻画问题的规模．

若对输入长度为 L 的具体问题，计算步数均有一个上界 $P(L)$，即关于 L 的多项式，则称这种算法为多项式时间算法，简称多项式算法．

多项式算法是一种比较好的算法，随着问题规模的增加，其计算时间增长并不是很大．单纯形算法是解线性规划问题的实用而有效的方法．然而它并非多项式算法．现实中存在的许许多多大型复杂的问题迫切需要有比单纯形方法更好的算法．苏联科学院计算中心的 L.G. Khachiyan 在 1979 年提出的椭球算法虽然是多项式时间"好的"算法．然而，椭球算法求解相同规模问题在一般情形下所需的计算量与在最坏情形下相差无几．椭球算法虽具有理论意义，但实用价值并不高．

1984 年，在美国贝尔实验室工作的 28 岁的印度数学家 Karmarkar 提出求解线性规划的另一个多项式算法．该算法在实践中可以和单纯形算法相媲美．在介绍 Karmarkar 算法之前，先给出一些预备知识．

首先给出单纯形的有关概念和性质．

给定 $j+1$ 个点 $v^0, v^1, \cdots, v^j$，如果 $\{v^i - v^0\}$ $(i=1,\cdots,j)$ 线性无关，则称这些点的凸组合

$$S = \left\{ w \mid w = \sum_{i=0}^{j} \lambda_i v^i,\ \lambda_i \geqslant 0,\ \sum_{i=0}^{j} \lambda_i = 1 \right\}$$

为 j 维单纯形，简记为 $S=[v^0, v^1, \cdots, v^j]$．

若 $\{u^0,\cdots,u^m\} \subset \{v^0,\cdots,v^j\}$，则称 $[u^0,\cdots,u^m]$ 为 S 的 m 维面，它是一个 m 维单纯形．S 的 1 维面又称为边，$v^0,\cdots,v^j$ 为顶点．

考虑 E^{n+1} 中的 n 维单纯形：

$$S=[e_1,\cdots,e_{n+1}]=\{x \mid x \geqslant 0, e^{\mathrm{T}}x=1\},$$

S 的 $n+1$ 个顶点为 $e_1,\cdots,e_{n+1}$；$n+1$ 个 $n-1$ 维面为

$$[e_1,\cdots,e_{k-1},e_{k+1},\cdots,e_{n+1}] = \left\{ x \mid x_k = 0,\ \sum_{i \neq k} x_i = 1, x_i \geqslant 0 \right\}.$$

如

$$[e_1,\cdots,e_n] = \left\{ x \mid x_{n+1} = 0,\ \sum_{i=1}^{n} x_i = 1, x_i \geqslant 0 \right\}.$$

S 的形心 $a_0 = \dfrac{1}{n+1}e$，其中 e 为 $n+1$ 维的全"1"向量．容易看出 S 外接球的半径为

$$R = \sqrt{\frac{n}{n+1}}.$$

S 内接球的半径为 $r = \sqrt{\dfrac{1}{n(n+1)}}$．

有
$$\frac{R}{r}=n.$$

设 $P_+=\{x\mid x\geqslant 0\}\subset E^n$. 给定 $a_1,\cdots,a_n>0$, 构造变换 $y=T(x)$:

$$y_i=\frac{(x_i/a_i)}{\left(\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j}{a_j}+1\right)},\quad i=1,\cdots,n, \tag{2.8.1}$$

$$y_{n+1}=\frac{1}{\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i}{a_i}+1}=1-\sum_{i=1}^{n}y_i.$$

则 $y=T(x)$ 有如下性质:

(1) 逆变换为 $x_i=a_iy_i/y_{n+1}$, $i=1,\cdots,n$.

(2) 将 P_+ 变为 $S=\{y\mid e^{\mathrm{T}}y=1,y\geqslant 0\}\subset E^n$. 将 P_+ 中由 $x_i=0$ 确定的面变为 S 的相应面 $y_i=0$ 上. 将 P_+ 的无穷远点变为 S 的面 $y_{n+1}=0$ 上.

Karmarkar 算法中用到的另一个变换为

$$y=\frac{D^{-1}x}{e^{\mathrm{T}}D^{-1}x}.$$

其中 $D=\mathrm{diag}(a_1,\cdots,a_n)$, $a_i>0(i=1,\cdots,n)$. 容易看出, 其逆为 $x=\frac{Dy}{e^{\mathrm{T}}Dy}$.

记 $S=\{x\mid x\geqslant 0, e^{\mathrm{T}}x=1, x=(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\}$, 则该变换是 S 到 S 上的变换, 且把 $a=(a_1,\cdots,a_n)^{\mathrm{T}}$ 变为 S 的形心 $\frac{1}{n}e$.

Karmarkar 算法是求解 Karmarkar 标准形的方法, 以后将说明, 如何将一般形式的线性规划问题化为这种标准形.

给定 Karmarkar 标准形

$$\begin{aligned} \min\quad & cx,\\ \text{s.t.}\quad & Ax=0,\\ & e^{\mathrm{T}}x=1,\\ & x\geqslant 0. \end{aligned}$$

$\frac{1}{n}e$ 是可行解, 且最优目标值为 0.

为使算法有较快的收敛速度, 希望从第 k 次迭代后, 或者有 $cx^{(k)}=0$, 或者 $cx^{(k)}\leqslant 2^{-q}cx^{(0)}$. 其中, $q>0$ 充分大, 2^{-q} 为精度, 即有 $\log_2 cx^{(k)}\leqslant\log_2 cx^{(0)}-q$. 为了得到这一结果, 定义势函数

$$f(x,c)=\sum_{j=1}^{n}\log_2\frac{cx}{x_j},$$

它在迭代中有一定程度的下降性.

Karmarkar 算法的基本思想: 对于 Karmarkar 标准形和相应的势函数 $f(x,c)$, 取 $x^{(0)}=\frac{1}{n}e$, 令 $k=0$, 算法第 k 步迭代包括以下环节.

设当前迭代点 $x^{(k)}>0$ 为标准形的可行解, 令 $D=\mathrm{diag}(x_1^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})$, 作变换

$$y=\frac{D^{-1}x}{e^{\mathrm{T}}D^{-1}x},\quad x\in S,$$

其逆为

$$x=\frac{Dy}{e^{\mathrm{T}}Dy},\quad y\in S.$$

则 $x^{(k)}$ 的像为 $\frac{1}{n}e$，而且 Karmarkar 标准形等价于

$$\left.\begin{array}{ll}\min & \bar{c}y,\\ \text{s.t.} & \bar{A}y=0,\quad y\in S.\end{array}\right\}\tag{2.8.2}$$

其最优值为 0，$\frac{1}{n}e$ 是可行解. 其中 $\bar{A}=AD$，$\bar{c}^{\mathrm{T}}=Dc^{\mathrm{T}}$，势函数化为

$$f(x,c)=f(y,\bar{c})-\sum_{j=1}^{n}x_j^k.$$

算法的主要环节是在问题(2.8.2)中求一个可行解 b'，使得相应的势函数 $f(y,\bar{c})$ 有所下降. 即

$$f(b',\bar{c})\leqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\delta,\quad \delta>0.$$

为此，考察 $f(y,\bar{c})$ 在 $\frac{1}{n}e$ 处的梯度投影方向. 点 $\frac{1}{n}e$ 满足(2.8.2)的等式约束

$$\bar{A}y=0,\ e^{\mathrm{T}}y=1.$$

令 $M=\begin{pmatrix}AD\\ e^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}$，则 M^{T} 为等式约束的梯度. M^{T} 所张成的子空间的正交补上的投影矩阵为

$$P=I-Q.$$

其中，$Q=M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M$，势函数 $f(y,\bar{c})$ 在 $\frac{1}{n}e$ 处的梯度为

$$\nabla_y f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)=\frac{n^2}{ce}\bar{c}^{\mathrm{T}}-ne.$$

势函数 $f(y,\bar{c})$ 在 $\frac{1}{n}e$ 处的梯度投影方向为

$$P\nabla f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)=P\left(\frac{n^2}{ce}\bar{c}^{\mathrm{T}}-ne\right)=P\,\frac{n^2}{ce}\bar{c}^{\mathrm{T}}=\frac{n^2}{ce}P\,\bar{c}^{\mathrm{T}}.$$

令 $c_P=\bar{c}P^{\mathrm{T}}$. 若 $c_P=0$，则 $\frac{1}{n}e$ 为问题(2.8.2)的解，从而 $x^{(k)}$ 为 Karmarkar 标准形的解. 不妨设 $c_P\neq0$，令 $\hat{c}=\frac{c_P}{\|c_P\|}$，这就是 $f(y,\bar{c})$ 在 $\frac{1}{n}e$ 处的梯度投影方向. 在 $\frac{1}{n}e$ 处，沿 $-\hat{c}$ 方向取一点

$$b'=\frac{1}{n}e-\alpha r\hat{c}^{\mathrm{T}}.$$

其中，$r=\frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}$ 为 S 内切球半径，α 为常数，满足 $0<\alpha<\sqrt{\frac{n-1}{n}}$，显然，$b'$ 是问题(2.8.2)的可行解，而且 $b'\in B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)=\left\{y\,\middle|\,\left\|y-\frac{1}{n}e\right\|^2\leqslant(\alpha r)^2\right\}$.

下面进一步考察 b' 的一些重要性质.

定理 2.19 b' 是问题

$$\left.\begin{aligned}&\min \quad \bar{c}y,\\&\text{s.t.}\quad y\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)\end{aligned}\right\}\tag{2.8.3}$$

的解,其中 $\Omega''=\{y\mid \bar{A}y=\mathbf{0},e^{\mathrm{T}}y=1\}$.

证明 问题(2.8.3)的 K-T 条件为

$$\bar{c}^{\mathrm{T}}+M^{\mathrm{T}}\left(\frac{u}{v}\right)+2\left(y-\frac{1}{n}e\right)\lambda=0,\quad \lambda\geqslant 0. \tag{2.8.4}$$

$$\lambda\left[\left(y-\frac{1}{n}e\right)^{\mathrm{T}}\left(y-\frac{1}{n}e\right)-\alpha^2r^2\right]=0,$$

$$\left(y-\frac{1}{n}e\right)^{\mathrm{T}}\left(y-\frac{1}{n}e\right)\leqslant\alpha^2r^2,$$

$$M\left(y-\frac{1}{n}e\right)=\mathbf{0}.$$

用 P 左乘(2.8.4),得

$$c_P^{\mathrm{T}}+2P\left(y-\frac{1}{n}e\right)\lambda=\mathbf{0}, \tag{2.8.5}$$

显然 $\lambda\neq0$. 由(2.8.4)和(2.8.5)可解出 $y=\frac{1}{n}e-\alpha r\hat{c}^{\mathrm{T}}=b'$ 为问题(2.8.3)的唯一 K-T 点. 由 K-T 充分条件知,b' 最优.

为了说明 $f(b',\bar{c})$ 比 $f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)$ 有一定程度的下降,先给出以下结果.

定理 2.20 对于问题(2.8.2)及相应的势函数 $f(y,\bar{c})$,有 $b\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$,使得 $\bar{c}\bar{b}=0$,或者 $f(\bar{b},\bar{c})\leqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\delta'$,其中 $\delta'>0$ 为常数.

证明 设 x' 是问题(2.8.2)的解,则 $\bar{c}x'=0$.

情形 1 若 $x'\in B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$,则取 $\bar{b}=x'$ 即为所求.

情形 2 若 $x'\notin B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$,设 $\bar{b}$ 是 $\frac{1}{n}e$ 与 x' 的连线同 $B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$ 边界之交点,则

$$\bar{b}'=(1-\lambda)\frac{1}{n}e+\lambda x',\quad \lambda\in(0,\ 1).$$

显然 $\bar{b}\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$,现证 $\bar{b}$ 即为所求.

$$\begin{aligned}f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(\bar{b},\bar{c})&=\sum_{j=1}^{n}\log_2\left(\frac{\bar{c}\,\frac{1}{n}e}{\frac{1}{n}}\cdot\frac{\bar{b}_j}{\bar{c}\bar{b}}\right)\\&=\sum_{j=1}^{n}\log_2\left(\frac{\bar{c}e}{\bar{c}\bar{b}}\bar{b}_j\right)\\&=\sum_{j=1}^{n}\log_2\left[\frac{\bar{c}e}{(1-\lambda)\frac{1}{n}\bar{c}e+\lambda\bar{c}x'}\left((1-\lambda)\frac{1}{n}+\lambda x'_j\right)\right]\\&=\sum_{j=1}^{n}\log_2\frac{n}{1-\lambda}\left((1-\lambda)\frac{1}{n}+\lambda x'_j\right)\\&=\sum_{j=1}^{n}\log_2\left(1+\frac{\lambda n}{1-\lambda}x'_j\right).\end{aligned}$$

由于当 $t_i \geqslant 0$ 时，有 $\prod_{i=1}^{n}(1+t_i) \geqslant 1+\sum_{i=1}^{n} t_i$，从而有 $\sum_{i=1}^{n}\log(1+t_i) \geqslant \log(1+\sum_{i=1}^{n} t_i)$，于是得到

$$
\begin{aligned}
f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(\bar{b},\bar{c}) &= \sum_{j=1}^{n}\log_2\left(1+\frac{\lambda n}{1-\lambda}x'_j\right)\\
&\geqslant \log_2\left(1+\frac{\lambda n}{1-\lambda}\sum_{j=1}^{n}x'_j\right)\\
&= \log_2\left(1+\frac{\lambda n}{1-\lambda}\right).
\end{aligned}
$$

又 $\bar{b}=(1-\lambda)\frac{1}{n}e+\lambda x'=\frac{1}{n}e+\lambda\left(x'-\frac{1}{n}e\right)$ 在 $B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$ 的边界上，故

$$
\alpha r=\left\|b-\frac{1}{n}e\right\|=\lambda\left\|x'-\frac{1}{n}e\right\|\leqslant\lambda R,
$$

$$
\lambda\geqslant\alpha\cdot\frac{r}{R}=\frac{\alpha}{n-1}.
$$

其中，R 为 S 的外接球半径. 因此

$$
1+\frac{\lambda n}{1-\lambda}\geqslant 1+\frac{n\dfrac{\alpha}{n-1}}{1-\dfrac{\alpha}{n-1}}>1+\alpha,
$$

$$
f\left(\frac{1}{n}e,\ \bar{c}\right)-f(\bar{b},\ \bar{c})>\log_2(1+\alpha)=\delta'.
$$

为进一步证得 b' 使势函数下降，先给出两个引理.

引理 1 若 $|\alpha|\leqslant\beta<1$，则 $|\log(1+\alpha)-\alpha|\leqslant\frac{\alpha^2}{2(1-\beta)}$.

证明 当 $|\alpha|<1$ 时，有

$$
|\log(1+\alpha)-\alpha|=\left|\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^{j-1}\frac{\alpha^j}{j}-\alpha\right|\leqslant\frac{\alpha^2}{2}(1+\beta+\beta^2+\cdots)=\frac{\alpha^2}{2(1-\beta)}.
$$

引理 2 设 $\beta=\alpha\sqrt{\frac{n}{n-1}}$，若 $x\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$，则 $\left|\sum_{j=1}^{n}\log\frac{x_j}{\frac{1}{n}}\right|\leqslant\frac{\beta^2}{2(1-\beta)}$.

证明

$$
\begin{aligned}
\left|\sum_{j=1}^{n}\log\frac{x_j}{\frac{1}{n}}\right| &= \left|\sum_{j=1}^{n}\log\frac{x_j}{\frac{1}{n}}-\sum_{j=1}^{n}\log\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right|\\
&= \left|\sum_{j=1}^{n}\log\left(1+\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right)-\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right|\\
&= \left|\sum_{j=1}^{n}\left\{\log\left(1+\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right)-\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right\}\right|\\
&\leqslant \sum_{j=1}^{n}\left|\log\left(1+\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right)-\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right|
\end{aligned}
$$

另一方面，$x\in B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$，$\left\|x-\frac{1}{n}e\right\|^2\leqslant\alpha^2r^2$，所以

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right)\leqslant n^2(\alpha^2r^2)=\frac{n}{n-1}\alpha^2=\beta^2,$$

$$\left|\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right|\leqslant\beta.$$

由引理 1 得 $\left|\sum_{j=1}^{n}\log\frac{x_j}{\frac{1}{n}}\right|\leqslant\frac{1}{2(1-\beta)}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{x_j-\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}}\right)\leqslant\frac{\beta^2}{2(1-\beta)}$.

下面给出 b' 的一个重要性质.

定理 2.21 对于问题(2.8.3)的解 $b'=\frac{1}{n}e-\alpha r$，或者 $\bar{c}b'=0$，或者 $f(b',\bar{c})\leqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\delta$. 其中，$\delta$ 为正常数.

证明 构造问题

$$\min\quad f(y,\bar{c}),$$
$$\text{s.t.}\quad y\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r.\right)$$

设 b_m 为其解，定义函数 $\tilde{f}(y)=n\log\frac{\bar{c}y}{\bar{c}\frac{1}{n}e}$.

$$f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(b',\bar{c})=\left[f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(b_m,\bar{c})\right]+\left[f(b_m,\bar{c})-f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\tilde{f}(b_m)\right]-\left[f(b',\bar{c})-f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\tilde{f}(b')\right]+[\tilde{f}(b_m)-\tilde{f}(b')].$$

如果 $\bar{c}b'=0$，证完；否则，分别估计以下各项

$$f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(b_m,\bar{c})\geqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-f(\bar{b},\bar{c})\geqslant\log(1+\alpha).$$

其中，$\bar{b}$ 为定理 2.20 中的有关量.

当 $y\in\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$ 时，有

$$\left|f(y,\bar{c})-f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\tilde{f}(y)\right|=\left|-\sum_{j=1}^{n}\log\frac{y_i}{\frac{1}{n}}\right|\leqslant\frac{\beta^2}{2(1-\beta)}.$$

特别当 $y=b_m$ 及 $y=b'$ 时，上式成立. 最后，$\tilde{f}(y)$ 是 $\bar{c}y$ 的单调增函数. b' 是 $\bar{c}y$ 在 $\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$ 上的极小. 所以，b' 也是 $\tilde{f}(y)$ 在 $\Omega''\cap B\left(\frac{1}{n}e,\alpha r\right)$ 上的极小. 从而有

$$\tilde{f}(b_m)\geqslant\tilde{f}(b').$$

由上述各项估计得到

$$\left|f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\tilde{f}(b',\bar{c})\right|\geqslant\log(1+\alpha)-\frac{\beta^2}{2(1-\beta)}-\frac{\beta^2}{2(1-\beta)}$$

$$=\log(1+\alpha)-\frac{\beta^2}{(1-\beta)}\geqslant\alpha-\frac{\alpha^2}{2}-\frac{n\alpha^2}{(n-1)\left(1-\alpha\sqrt{\frac{n}{n-1}}\right)}.$$

令 $\delta(n)=\alpha-\frac{\alpha^2}{2}-\frac{n\alpha^2}{(n-1)\left(1-\alpha\sqrt{\frac{n}{n-1}}\right)}$.容易看出,有 $\delta>0$,使得 $\delta(n)\geqslant\delta>0$.

该定理表明,可以用问题(2.8.3)的解 b' 作为问题(2.8.2)的势函数下降点.在第 k 步迭代的最后,用 b' 的原像作 $x^{(k)}$ 的后继点:

$$x^{(k+1)}=\frac{Db'}{e^{\mathrm{T}}Db'}.$$

显然,$x^{(k+1)}>0$, $x^{(k+1)}\in S$, $Ax^{(k+1)}=0$, $x^{(k+1)}$ 为问题(2.8.1)的可行解.因此,对问题(2.8.1)的 Karmarkar 算法的计算步骤可归纳如下.

令 $x^{(0)}=\frac{1}{n}e$, $k=0$.若 $cx^{(k)}\leqslant2^{-q}cx^{(0)}$ 则停,否则,令

$$x^{(k+1)}=\varphi(x^{(k)}),\quad k=0,1,2,\cdots.$$

而 $b=\varphi(a)$ 由下述运算构成:

(1) 令 $D=\mathrm{diag}(a_1,\cdots,a_n)$, $M=\begin{pmatrix}AD\\ e^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}$,

$$c_P^{\mathrm{T}}=(I-M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M)DC^{\mathrm{T}},$$

$$\hat{c}^{\mathrm{T}}=\frac{c_P^{\mathrm{T}}}{\|c_P\|}.$$

(2) 令 $$b'=\frac{1}{n}e-\alpha r\hat{c}^{\mathrm{T}}.$$

其中,$r=\frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}$, $\alpha\in\left(0,\sqrt{\frac{n-1}{n}}\right)$.

(3) $b=\frac{Db'}{e^{\mathrm{T}}Db'}$.

现在,证明该算法的两个主要结果:势函数 $f(x,c)$ 是下降的;算法是多项式时间型的.

定理 2.22 在 Karmarkar 算法中,或者有 $cx^{(k+1)}=0$,或者有 $f(x^{(k+1)},c)\leqslant f(x^{(k)},c)-\delta$.

证明 由定理 2.21,对算法得到的 b' 或者 $\bar{c}b'=0$,或者 $f(b',\bar{c})\leqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\delta$.若 $\bar{c}b'=0$,则有

$$\bar{c}b'=cDb=cD\frac{D^{-1}x^{(k+1)}}{e^{\mathrm{T}}D^{-1}x^{(k+1)}}=\frac{cx^{(k+1)}}{e^{\mathrm{T}}D^{-1}x^{(k+1)}}.$$

从而有 $cx^{(k+1)}=0$.

若 $f(b',\bar{c})\leqslant f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)-\delta$.由于

$$f(b',\bar{c})-f\left(\frac{1}{n}e,\bar{c}\right)=\sum_{j=1}^{n}\log\frac{\bar{c}b'}{b'_j}-\sum_{j=1}^{n}\log\frac{\bar{c}\frac{1}{n}e}{\frac{1}{n}}$$
$$=f(x^{(k+1)},c)-f(x^{(k)},c),$$

从而有 $f(x^{(k+1)},c)\leqslant f(x^{(k)},c)-\delta$.

定理 2.23 Karmarkar 算法最多迭代 $o(nq)$ 步后可终止,即算法是多项式时间型的.

证明 假设 $cx^{(i)} \neq 0 \quad (i=0, 1, \cdots, k)$,则有

$$\left.\begin{aligned} & f(x^{(k)}, c) \leqslant f(x^{(0)}, c) - k\delta, \\ & \sum_{j=1}^{n} \log \frac{cx^{(k)}}{x_j^{(k)}} \leqslant \sum_{j=1}^{n} \log \frac{cx^{(0)}}{x_j^{(0)}} - k\delta. \end{aligned}\right\} \tag{2.8.6}$$

由于

$$\left(\prod_{j=1}^{n} x_j^{(k)}\right)^{1/n} \leqslant \frac{1}{n}\left(\sum_{j=1}^{n} x_j^{(k)}\right) = \frac{1}{n},$$

$$\prod_{j=1}^{n} x_j^{(k)} \leqslant \left(\frac{1}{n}\right)^n = (x_j^{(0)})^n,$$

$$\sum_{j=1}^{n} \log x_j^{(k)} \leqslant \sum_{j=1}^{n} \log x_j^{(0)},$$

由(2.8.6)可得

$$n \log \frac{cx^{(k)}}{cx^{(0)}} \leqslant -k\delta,$$

$$\frac{cx^{(k)}}{cx^{(0)}} \leqslant 2^{-\frac{k\delta}{n}}.$$

令$\frac{k\delta}{n} = q$,则 $k = \frac{nq}{\delta}$.

最后讨论一般线性规划问题的求解,给定一般形式的线性规划问题

$$\left.\begin{aligned} & \max \quad cx, \\ & \text{s.t.} \quad Ax \leqslant b, x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.8.7}$$

现在把它化为 Karmarkar 算法标准形.问题(2.8.7)等价于线性不等式组

$$\begin{aligned} & Ax \leqslant b, x \geqslant 0, \\ & y^{\mathrm{T}} A \geqslant c, y \geqslant 0, \\ & cx \geqslant b^{\mathrm{T}} y. \end{aligned}$$

引入松弛变量后,该不等式组又等价于$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \tilde{x} \geqslant 0$.

取$\tilde{x}^{(0)} \geqslant 0$,不妨设$\tilde{A}\tilde{x}^{(0)} \neq \tilde{b}$,构造问题

$$\left.\begin{aligned} & \max \quad \lambda, \\ & \text{s.t.} \quad \tilde{A}\tilde{x} - \tilde{b} = \lambda(\tilde{A}\tilde{x}^{(0)} - \tilde{b}), \\ & \tilde{x} \geqslant 0, \lambda \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.8.8}$$

该问题有正的可行解$\begin{pmatrix} \tilde{x}^{(0)} \\ 1 \end{pmatrix}$.显然问题(2.8.7)有解等价于问题(2.8.8)的最优解$\lambda = 0$.这样,问题(2.8.7)等价于一个具有等式约束、非负约束、有正可行解和最优值为 0 的线性规划问题.为简化记号,记问题(2.8.8)的更一般的形式为

$$\left.\begin{aligned} & \min \quad cx, \\ & \text{s.t.} \quad Ax \leqslant b, x \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{2.8.9}$$

有可行解 $a = (a_1, \cdots, a_n) > 0$;最优值为 0.

可见,一般形式的线性规划问题都可划为一个与之等价的(2.8.9),在把(2.8.9)化为 Karmarkar 标准形、作变换

$$y_i = \frac{x_i/a_i}{\sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{a_i} + 1}, \quad i = 1, \cdots, n,$$

$$y_{n+1} = 1 - \sum_{i=1}^{n} y_i .$$

于是问题(2.8.9)又等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^{n} c_i a_i y_i, \\ \text{s.t.} \quad & AD \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{r1} \end{pmatrix} - b y_{n+1} = 0, \\ & \sum_{i=1}^{n+1} y_i = 1, y \geqslant 0. \end{aligned}$$

$\frac{1}{n}e$ 可行，最优值为 0. 此即 Karmarkar 标准形.

上述方法在理论上是可行的. 但由于在变换过程中导致问题规模变大，因而是不实用的. 获得 Karmarkar 标准形的滑动目标函数法是一种比较实用的方法，此处从略.

2.9 线性规划程序求解

用 Matlab 优化工具箱解线性规划模型及命令如下.

(1) 模型:

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leqslant b. \end{aligned}$$

命令: x = linprog(c, A, b).

(2) 模型:

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leqslant b, \\ & Aeq \cdot x = beq. \end{aligned}$$

命令: x = linprog(c, A, b, Aeq, beq).

注意: 若没有不等式: $Ax \leqslant b$ 存在，则令 $A = [\,]$, $b = [\,]$.

(3) 模型:

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = cx, \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leqslant b, \\ & Aeq \cdot x = beq, \\ & vlb \leqslant x \leqslant vub. \end{aligned}$$

命令: ① x = linprog(c, A, b, Aeq, beq, ulb, vlb);

② x = linprog(c, A, b, Aeq, beq, ulb, vlb, $x0$);

注意: ① 若没有等式约束: $Aeq \cdot X = beq$, 则令 $Aeq = [\,]$, $beq = [\,]$;

② 其中 x_0 表示初始点.

(4) 命令: [x, fval] = linprog(...),

返回最优解 x 及 x 处的目标函数值 $fval$.

例 2.19　任务分配问题　某车间有甲、乙两台机床,可用于加工 3 种工件.假定这两台车床的可用台时数分别为 800 和 900,3 种工件的数量分别为 400,600 和 500,且已知用 3 种不同车床加工单位数量不同工件所需的台时数和加工费用见表 2.21.问怎样分配车床的加工任务,才能既满足加工工件的要求,又使加工费用最低?

表 2.21

车床类型	单位工件所需加工台时数			单位工件的加工费用/元			可用台时数
	工件 1	工件 2	工件 3	工件 1	工件 2	工件 3	
甲	0.4	1.1	1.0	13	9	10	800
乙	0.5	1.2	1.3	11	12	8	900

解　设在甲车床上加工工件 1,2,3 的数量分别为 x_1,x_2,x_3,在乙车床上加工工件 1,2,3 的数量分别为 x_4,x_5,x_6.可建立以下模型:

$$
\begin{aligned}
\min\quad & Z = 13x_1 + 9x_2 + 10x_3 + 11x_4 + 12x_5 + 8x_6,\\
\text{s.t.}\quad & x_1 + x_4 = 400,\\
& x_2 + x_5 = 600,\\
& x_3 + x_6 = 500,\\
& 0.4x_1 + 1.1x_2 + x_3 \leqslant 800,\\
& 0.5x_4 + 1.2x_5 + 1.3x_6 \leqslant 900,\\
& x_i \geqslant 0,\quad i = 1,2,\cdots,6.
\end{aligned}
$$

化为标准形式为

$$
\begin{aligned}
\min\quad & Z = (13\ \ 9\ \ 10\ \ 11\ \ 12\ \ 8)\boldsymbol{x},\\
\text{s.t.}\quad & \begin{pmatrix} 0.4 & 1.1 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 1.2 & 1.3 \end{pmatrix}\boldsymbol{x} \leqslant \begin{pmatrix} 800\\ 900 \end{pmatrix},\\
& \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 400\\ 600\\ 500 \end{pmatrix},\\
& \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1\\ x_2\\ x_3\\ x_4\\ x_5\\ x_6 \end{pmatrix} \geqslant \boldsymbol{0}.
\end{aligned}
$$

程序:

```
c=[13 9 10 11 12 8];
A=[0.4 1.1 1 0 0 0
   0 0 0 0.5 1.2 1.3];
b=[800;900];
Aeq=[1 0 0 1 0 0
     0 1 0 0 1 0
```

```
        0 0 1 0 0 1];
beq = [400 600 500];
vlb = zeros(6,1);
vub = [];
[x, fval] = linprog(c, A, b, Aeq, beq, vlb, vub)
```

结果：$x=\begin{pmatrix}0.0000\\600.0000\\0.0000\\400.0000\\0.0000\\500.0000\end{pmatrix}$，

fval = 1.3800e+004，

即在甲机床上加工600个工件2，在乙机床上加工400个工件1、500个工件3，可在满足条件的情况下使总加工费最少，为13800元.

例2.20 某厂每日8小时的产量不低于1800件.为了进行质量控制，计划聘请两种不同水平的检验员.一级检验员的标准为：速度25件/小时，正确率98%，计时工资4元/小时；二级检验员的标准为：速度15小时/件，正确率95%，计时工资3元/小时.检验员每错检一次，工厂要损失2元.为使总检验费用最省，该工厂应聘一级、二级检验员各几名？

分析：设需要一级和二级检验员的人数分别为 x_1, x_2 人，则应付检验员的工资为

$$8\times4\times x_1+8\times3\times x_2=32x_1+24x_2.$$

因检验员错检而造成的损失为

$$(8\times25\times2\%\times x_1+8\times15\times5\%\times x_2)\times2=8x_1+12x_2,$$

故目标函数为

$$\min Z=(32x_1+24x_2)+(8x_1+12x_2)=40x_1+36x_2,$$

约束条件为

$$\begin{aligned}&8\times25\times x_1+8\times15\times x_2\geqslant1800,\\&8\times25\times x_1\leqslant1800,\\&8\times15\times x_2\leqslant1800,\\&x_1\geqslant0,\quad x_2\geqslant0.\end{aligned}$$

模型为

$$\begin{aligned}\min\quad&Z=40x_1+36x_2,\\\text{s.t.}\quad&5x_1+3x_2\geqslant45,\\&x_1\leqslant9,\\&x_2\leqslant15,\\&x_1\geqslant0,x_2\geqslant0\end{aligned}$$

标准形式为

$$\min\quad Z=(40\quad36)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}\text{s.t.}\quad&(-5\quad-3)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}\leqslant-45,\\&0\leqslant x_1\leqslant9,\\&0\leqslant x_2\leqslant15.\end{aligned}$$

算法：

```
c=[40;36];
A=[-5   -3];
b=[-45];
Aeq=[];
beq=[];
vlb=zeros(2,1);
vub=[9;15];
[x,fval]=linprog(c,A,b,Aeq,beq,vlb,vub)
```

结果：

```
x=9.0000
  0.0000
fval=360
```

即只需聘用 9 个一级检验员.

注：本问题应还有一个约束条件：x_1，x_2 取整数，故它是一个整数线性规划问题.这里把它当成一个线性规划来解，求得其最优解刚好是整数：$x_1=9$，$x_2=0$，故它就是该整数规划的最优解.若用线性规划解法求得的最优解不是整数，将其取整后不一定是相应整数规划的最优解，这样的整数规划问题后面有专门章节介绍.

例 2.21 某工厂要以 4 种合金 T_1，T_2，T_3 和 T_4 为原料，经熔炼生产一种新的不锈钢 G.这四种原料含元素铬(Cr)，锰(Mn)和镍(Ni)的质量分数(单位：%)、单价以及新的不锈钢材料 G 所要求的 Cr，Mn 和 Ni 的最低质量分数见表 2.22.

表 2.22

	T_1	T_2	T_3	T_4	G
Cr	3.21	4.53	2.19	1.76	3.20
Mn	2.04	1.12	3.57	4.33	2.10
Ni	5.82	3.06	4.27	2.73	4.30
单价/(元/kg)	115	97	82	76	

设熔炼时质量没有损耗，要熔炼成 100kg 不锈钢 G，应选用原料 T_1，T_2，T_3 和 T_4 各多少千克，使成本最小.

解 设选用原料 T_1，T_2，T_3 和 T_4 分别为 x_1，x_2，x_3，x_4 kg，根据条件，可建立相应的线性规划模型：

$$
\begin{aligned}
\min\quad & 115x_1+97x_2+82x_3+76x_4,\\
\text{s.t.}\quad & 0.0321x_1+0.0453x_2+0.0219x_3+0.0176x_4\geqslant 3.20,\\
& 0.0204x_1+0.0112x_2+0.0357x_3+0.0433x_4\geqslant 2.10,\\
& 0.0582x_1+0.0306x_2+0.0427x_3+0.0273x_4\geqslant 4.30,\\
& x_1+x_2+x_3+x_4=100,\\
& x_1,x_2,x_3,x_4\geqslant 0.
\end{aligned}
$$

程序：

```
c=[115 97 82 76];
A=[-0.0321 -0.0453 -0.0219 -0.0176
```

```
      -0.0204  -0.0112  -0.0357  -0.0433
      -0.0582  -0.0306  -0.0427  -0.0273];
b=[-3.2;-2.1;-4.3];
Aeq=[1 1 1 1];
beq=[100];
vlb=zeros(6,1);
vub=[];
[x,fval]=linprog(c,A,b,Aeq,beq,vlb,vub)
```

结果:

$$x=\begin{bmatrix}26.5840\\31.5745\\41.8415\\0.0000\end{bmatrix}$$

$$Z=9.5509e+003$$

这个线性规划问题的最优解是

$$x_1=26.5840,\quad x_2=31.5745,\quad x_3=41.8415,\quad x_4=0.$$

最低成本为 $z=9550.9$(元).

习 题

1. 用单纯形方法解下列线性规划问题:

(1)
$$\begin{aligned}\min\quad & 3x_1-5x_2-2x_3-x_4,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2+x_3\leqslant 4,\\ & 4x_1-x_2+x_3+2x_4\leqslant 6,\\ & -x_1+x_2+2x_3+3x_4\leqslant 12,\\ & x_j\geqslant 0,\quad j=1,\cdots,4.\end{aligned}$$

(2)
$$\begin{aligned}\min\quad & -3x_1-x_2,\\ \text{s.t.}\quad & 3x_1+3x_2+x_3=30,\\ & 4x_1-4x_2+x_4=16,\\ & 2x_1-x_2\leqslant 12,\\ & x_j\geqslant 0,\quad j=1,\cdots,4.\end{aligned}$$

(3)
$$\begin{aligned}\max\quad & x_1+3x_2,\\ \text{s.t.}\quad & 2x_1+3x_2+x_3=6,\\ & -x_1+x_2+x_4=1,\\ & x_j\geqslant 0,\quad j=1,\cdots,4.\end{aligned}$$

2. 假设用单纯形方法解线性规划问题

$$\begin{aligned}\min\quad & \boldsymbol{cx},\\ \text{s.t.}\quad & \boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b},\\ & \boldsymbol{x}\geqslant \boldsymbol{0}.\end{aligned}$$

某次迭代中对应变量 x_j 的判别数 $\sigma_j<0$,且单纯表中相应的列 $\boldsymbol{y}_j=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{p}_j\leqslant\boldsymbol{0}$. 证明

$$d = \begin{pmatrix} -y_j \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

是可行域的极方向.其中分量 1 对应 x_j.

3. 设矩阵 A 非奇异,$C=\{x \mid Ax \leqslant 0, x \in E^n\}$.试证明 C 是闭凸集,且原点 O 是 C 的唯一极点.

4. 设 S 是 E^n 中的非空集合,试证明 S 是凸集的充要条件是:对每个 $k \geqslant 2$,当 $x_1, x_2, \cdots, x_k \in S$,有

$$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j x \in S.$$

其中,$\lambda_j \geqslant 0, j=1,2,\cdots,k$; $\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1$.

5. 分别用大 M 法和两阶段单纯形法求解

(1) $$\begin{aligned} \min\quad & 2x_1+x_2-x_3-x_4, \\ \text{s.t.}\quad & x_1-x_2+x_3-x_4=2, \\ & 2x_1+x_2-3x_3+x_4=6, \\ & x_1+x_2+x_3+x_4=7, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j=1,\cdots,4. \end{aligned}$$

(2) $$\begin{aligned} \max\quad & -3x_1+2x_2-x_3, \\ \text{s.t.}\quad & 2x_1+x_2-x_3 \leqslant 5, \\ & 4x_1+3x_2+x_3 \geqslant 3, \\ & -x_1+x_2+x_3=2 \\ & x_1,\ x_2,\ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

(3) $$\begin{aligned} \min\quad & 3x_1-2x_2+x_3, \\ \text{s.t.}\quad & 2x_1-3x_2+x_3=1, \\ & 2x_1+3x_2 \geqslant 8, \\ & x_1,\ x_2,\ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

(4) $$\begin{aligned} \max\quad & 2x_1+x_2, \\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2 \leqslant 5, \\ & x_1-x_2 \geqslant 0, \\ & 6x_1+2x_2 \leqslant 21, \\ & x_1,\ x_2 \geqslant 0. \end{aligned}$$

6. 写出下列原问题的对偶问题

(1) $$\begin{aligned} \max\quad & 4x_1-3x_2+5x_3, \\ \text{s.t.}\quad & 3x_1+x_2+2x_3 \leqslant 15, \\ & -x_1+2x_2-7x_3 \geqslant 3, \\ & x_1+x_3=1, \\ & x_1,\ x_2,\ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

(2) $$\begin{aligned} \min\quad & -4x_1-5x_2-7x_3+x_4, \\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2+2x_3-x_4 \geqslant 1, \\ & 2x_1-6x_2+3x_3+x_4 \leqslant -3, \\ & x_1+4x_2+3x_3+2x_4=-5, \end{aligned}$$

$x_1, \quad x_2, \qquad x_4 \geqslant 0.$

7. 给定线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & 5x_1 + 21x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - x_2 + 6x_3 \geqslant b_1, \\ & x_1 + x_2 + 2x_3 \geqslant 1, \\ & x_1, \ x_2, \ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

其中,b_1 是某一个正数,已知这个问题的一个最优解为 $(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}\right)$,则

(1) 写出对偶问题;

(2) 求对偶问题的最优解.

8. 考虑线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \boldsymbol{cx} \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0}. \end{aligned}$$

其中,$\boldsymbol{A}$ 是 m 阶对称矩阵,$\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{b}$. 证明若 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 是上述问题的可行解,则它也是最优解.

9. 用对偶单纯形法解下列问题

(1)
$$\begin{aligned} \max \quad & x_1 + x_2, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - x_2 - x_3 = 1, \\ & -x_1 + x_2 + 2x_3 \geqslant 1, \\ & x_1, \ x_2, \ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

(2)
$$\begin{aligned} \max \quad & -4x_1 + 3x_2, \\ \text{s.t.} \quad & 4x_1 + 3x_2 + x_3 - x_4 = 32, \\ & 2x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 14, \\ & x_j \geqslant 0, \ j = 1, \cdots, 4. \end{aligned}$$

10. 考虑下列线性规划问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -5x_1 + 5x_2 + 13x_3, \\ \text{s.t.} \quad & -x_1 + x_2 + 3x_3 \leqslant 20, \\ & 12x_1 + 4x_2 + 10x_3 \leqslant 90, \\ & x_1, \ x_2, \ x_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

先用单纯形方法求出上述问题的最优解,然后对原来问题分别进行下列改变,试用原来问题的最优表求新问题的最优解:

(1) 目标函数中 x_3 的系数 c_3 由 13 改变为 8;

(2) b_1 由 20 改变为 30;

(3) b_2 由 90 改变为 70;

(4) $\boldsymbol{A}$ 的列 $\begin{pmatrix} -1 \\ 12 \end{pmatrix}$ 改变为 $\begin{pmatrix} 0 \\ 5 \end{pmatrix}$.

11. 线性规划问题

$$\begin{aligned} (L_1) \quad \max \quad & Z_1 = \sum_{j=1}^{m} c_j x_j, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leqslant b_i, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j = 1, 2, \cdots, n. \end{aligned}$$

已知 $y^* = (y_1^*, y_2^*, \cdots, y_m^*)$ 是其对偶问题的最优解.

又设线性规划问题

$$(L_2)\quad \max \quad Z_2 = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j,$$

$$\text{s.t.}\quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leqslant b_i + k_i,\quad i = 1,2,\cdots,m,$$

$$x_j \geqslant 0,\quad j = 1,2,\cdots,n.$$

其中,k 是给定常数.试证明

$$\max Z_2 \leqslant \max Z_1 + \sum_{i=1}^{m} k_i y_i^* .$$

12. 某工厂用甲、乙、丙三种原料生产 A,B,C,D 四种产品,每种产品消耗原料定额以及三种原料的数量见 2.23.

表 2.23

产　　品	A	B	C	D	原料数量/t
对原料甲的单耗/(t/万件)	3	2	1	4	2400
对原料乙的单耗/(t/万件)	2	—	2	3	3200
对原料丙的单耗/(t/万件)	1	3	—	2	1800
单位产品的利润/(万元/万件)	25	12	14	15	

(1) 求使总利润最大的生产计划和按最优生产计划生产时三种原料的耗用量和剩余量;

(2) 求四种产品的利润在什么范围内变化,最优生产计划不会变化;

(3) 求三种原料的影子价格和四种产品的机会成本,并解释最优生产计划中有的产品不安排生产的原因;

(4) 在最优生产计划下,哪一种原料更为紧缺? 如果甲原料增加 120t,这时紧缺程度是否有变化?

第3章 非线性规划

3.1 非线性规划模型和基础理论

3.1.1 非线性规划模型

选址问题 设有 n 个市场,第 j 个市场的位置为(a_j, b_j),对某种货物的需要量为 q_j, $j=1,\cdots,n$.现计划建立 m 个货栈,第 i 个货栈的容量为c_i, $i=1,\cdots,m$.试确定货栈的位置,使各货栈到各市场的运输量与路程乘积之和最小.

现在来建立数学模型.设第 i 个货栈的位置为(x_i, y_i), $i=1,\cdots,m$.第 i 个货栈供给第 j 个市场量为w_{ij}, $i=1,\cdots,m$, $j=1,\cdots,n$.第 i 个货栈到第j 个货栈的距离为d_{ij},一般定义为

$$d_{ij}=\sqrt{(x_i-a_j)^2+(y_i-b_j)^2}.$$

目标是使运输量与路程乘积之和最小,即使

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}w_{ij}\sqrt{(x_i-a_j)^2+(y_i-b_j)^2}$$

最小.约束条件是:

(1) 每个货栈向各市场提供的货物量之和不能超过它的容量;

(2) 每个市场从各货栈得到的货物量之和应等于它的需要量;

(3) 运输量不能为负数.

因此,问题的数学模型为

$$\begin{aligned}
\min\quad & \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}w_{ij}\sqrt{(x_i-a_j)^2+(y_i-b_j)^2}\\
\text{s.t.}\quad & \sum_{j=1}^{n}w_{ij}\leqslant c_i,\\
& \sum_{i=1}^{m}w_{ij}=q_j,\\
& w_{ij}\geqslant 0.
\end{aligned}$$

其中,$i=1,\cdots,m$;$j=1,\cdots,n$.

这个模型中,目标函数是非线性函数.若目标函数及约束条件中至少存在一个非线性函数,则称之为非线性规划问题(nonlinear programming problem),简记为 NLP 问题.

一般的非线性规划问题,根据约束条件的情况可分为两种.

(1) 无约束非线性规划问题,即没有任何约束条件的非线性规划问题,有时也称之为无

约束优化问题或简称为无约束问题，常写成

$$\min f(x), x \in E^n.$$

其中，$f(x)$是定义在 E^n 上的实函数.这个问题是求 $f(x)$在 n 维欧氏空间中的极小点.

(2) 约束非线性规划问题，即至少有一个约束条件限制的非线性规划问题，有时也称之为约束优化问题或简称为有约束问题.

一般而言，约束非线性规划问题总可以表示为

$$\left.\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \leqslant 0, \quad i=1,2,\cdots,m, \\ & h_j(x)=0, \quad j=1,2,\cdots,l, \end{aligned}\right\} \tag{3.1.1}$$

在进行理论讨论时，为方便起见，往往引入向量值函数

$$\begin{cases} \boldsymbol{g}(x) = (g_1(x), g_2(x), \cdots, g_m(x))^{\mathrm{T}}, \\ \boldsymbol{h}(x) = (h_1(x), h_2(x), \cdots, h_l(x))^{\mathrm{T}}. \end{cases}$$

于是约束非线性规划又常常写为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{g}(x) \leqslant \boldsymbol{0}, \\ & \boldsymbol{h}(x) = \boldsymbol{0}. \end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & x \in D. \end{aligned}$$

其中，$D = \{x \mid \boldsymbol{g}(x) \leqslant \boldsymbol{0}, \boldsymbol{h}(x) = \boldsymbol{0}, x \in E^n\}$.

由于非线性规划的目标函数及约束条件的复杂性，现在还没有一种算法能保证找到任何一个非线性规划的全局最优解，而往往只能找到某个局部最优解，因此，需要对全局最优解及局部最优解分别给出定义.

定义 3.1 局部最优解(local optimal solution) 设 D 是非线性规划问题(3.1.1)的可行域，$x^* \in D$，若存在 x^* 的一个邻域 $N(x^*, \delta)$，若对任一点 $x \in D \cap N(x^*, \delta)$，都有 $f(x^*) \leqslant f(x)$，则称 x^* 是非线性规划(3.1.1)的一个局部最优(极小)解.

特别地，若 $f(x^*) < f(x)$成立，则称 x^* 是一个严格局部最优(极小)解.

定义 3.2 全局最优解(global optimal solution) 设 $x^* \in D$，若对 D 中任一点 x，都有 $f(x^*) \leqslant f(x)$，则称 x^* 是非线性规划(3.1.1)的一个全局最优(最小)解.

3.1.2 梯度与 Hessian 矩阵

定义 3.3 梯度(gradient) 设 n 元函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 可微，则称向量

$$\nabla f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$$

为函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 处的梯度.

梯度的几何意义：如果函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 的梯度 $\nabla f(\bar{x})$是非零向量，那么 $\nabla f(\bar{x})$就是 $f(x)$的等值面在点 $\bar{x}$ 处的法向量，垂直于等值面在点 $\bar{x}$ 的切平面，且指向 $f(x)$的函数值增大的方向.

定义 3.4 Hessian 矩阵(Hessian matrix) 设 n 元函数 $f(x)$在 $\bar{x}$ 点二次可微，将 $f(x)$在 $\bar{x}$ 点的二阶偏导数按如下组成矩阵 $\nabla^2 f(\bar{x})$，则称 $\nabla^2 f(\bar{x})$是函数 $f(x)$在 $\bar{x}$ 点的 Hessian

矩阵：

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix},$$

在不引起误解的情况下，常常将$\nabla^2 f(\bar{x})$记为 $\boldsymbol{H}(\bar{x})$.

显然，当 $f(x)$二阶连续可微时，其 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(\bar{x})$是对称矩阵.

设向量函数 $\boldsymbol{p}(x)$的每个分量 p_i 均为关于$\boldsymbol{x}$ 的可微函数$p_i(x)$，显然可求每个 $p_i(x)$的梯度$\nabla p_i(x)$，则可定义关于向量函数 $\boldsymbol{p}(x)$的梯度为

$$\nabla \boldsymbol{p}(x) = (\nabla p_1(x), \cdots, \nabla p_n(x)), \tag{3.1.2}$$

显然，$\nabla \boldsymbol{p}(x)$是一个 n 阶方阵.

由 Hessian 矩阵的定义可知，函数 $f(x)$的 Hessian 矩阵的第 j 列就是$f(x)$关于 x_j 的一阶偏导$\frac{\partial f(x)}{\partial x_j}$(即梯度$\nabla f(x)$的第 j 分量)的梯度，因此，由(3.1.2)，Hessian 矩阵又可表示为

$$\nabla^2 f(x) = \nabla(\nabla f(x)). \tag{3.1.3}$$

(3.1.3) 揭示了 Hessian 矩阵与梯度的内在关系，容易证明下列结论成立：

(1) 设 $\boldsymbol{C}$ 为常数向量，$\boldsymbol{0}$为零矩阵，则有

$$\nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{0};$$

(2) 设 $\boldsymbol{x} \in E^n$，$\boldsymbol{I}$ 为n 阶单位矩阵，则有

$$\nabla \boldsymbol{x} = \boldsymbol{I};$$

(3) 设 $\boldsymbol{x} \in E^n$，$\boldsymbol{b}$ 为常数向量，则有

$$\nabla(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{b};$$

(4) 设 $\boldsymbol{x} \in E^n$，$\boldsymbol{Q}$ 为常数矩阵，则有

$$\nabla(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{Q};$$

(5) 设 $\boldsymbol{x} \in E^n$，$\boldsymbol{Q}$ 为常数对称矩阵，则有

$$\nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}.$$

定义 3.5　方向导数(direction derivative)　设 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 可微，$\boldsymbol{d}$ 是给定的非零向量，如果极限

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{f(\bar{x} + t\boldsymbol{d}) - f(\bar{x})}{t}$$

存在，则称此极限为函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 沿方向$\boldsymbol{d}$ 的方向导数，并记为$\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial \boldsymbol{d}}$.

定义 3.6　下降方向(descent direction)　设 $\boldsymbol{d}$ 为非零向量，若存在正数 $\varepsilon > 0$，当 $t \in (0, \varepsilon)$时，必有

$$f(\bar{x} + t\boldsymbol{d}) < f(\bar{x}),$$

则称方向 $\boldsymbol{d}$ 是函数$f(x)$在点 $\bar{x}$ 处的一个下降方向.

定理 3.1　如果函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 沿方向$\boldsymbol{d}$ 的方向导数满足条件

$$\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial \boldsymbol{d}}<0,$$

那么方向 $\boldsymbol{d}$ 必是函数 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 处的一个下降方向.

证明 因为

$$\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial \boldsymbol{d}}<0,$$

有

$$\lim_{t\to 0^+}\frac{f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})-f(\bar{x})}{t}<0,$$

所以,存在 $\varepsilon>0$,当 $0<t<\varepsilon$ 时,有

$$\frac{f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})-f(\bar{x})}{t}<0,$$

故

$$f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})<f(\bar{x}).$$

由下降方向的定义,可知 $\boldsymbol{d}$ 是 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的一个下降方向.

3.1.3 多元函数的 Taylor 展式

在最优化理论中,常用的 Taylor 展式有一阶展式和二阶展式,每阶展式都有两种等价的表达式.

设 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 存在一阶连续偏导,那么,$f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的一阶 Taylor 展开式为

$$f(x)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})+o(\|x-\bar{x}\|). \tag{3.1.4}$$

其中,$o(\|x-\bar{x}\|)$ 是变量 $\|x-\bar{x}\|$ 的高阶无穷小量.

由微分中值定理,(3.1.4)可等价地表示为

$$f(x)=f(\bar{x})+\nabla f(x')^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}). \tag{3.1.5}$$

其中,$x'=\lambda x+(1-\lambda)\bar{x},0\leqslant\lambda\leqslant 1$.

若 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 处二阶可微,则可得 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的二阶 Taylor 展式为

$$f(x)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x})+o(\|x-\bar{x}\|^2). \tag{3.1.6}$$

同样,(3.1.6)的等价形式为

$$f(x)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x')(x-\bar{x}). \tag{3.1.7}$$

其中,$x'=\lambda x+(1-\lambda)\bar{x},0\leqslant\lambda\leqslant 1$.

由一阶 Taylor 展式,可推出如下关于下降方向的充分条件.

定理 3.2 设向量 $\boldsymbol{d}\neq\boldsymbol{0}$,函数 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的梯度 $\nabla f(\bar{x})$ 存在.若 $\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}<0$,则 $\boldsymbol{d}$ 是 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的下降方向.

证明 不失一般性,可设 $\boldsymbol{d}$ 是单位向量,由(3.1.4),有

$$\begin{aligned}
f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})&=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(t\boldsymbol{d})+o(\|t\boldsymbol{d}\|)\\
&=f(\bar{x})+t\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}+o(t),\\
\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial \boldsymbol{d}}&=\lim_{t\to 0^+}\frac{f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})-f(\bar{x})}{t}\\
&=\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}<0.
\end{aligned}$$

由定理 3.1 可知,$\boldsymbol{d}$ 是 $f(x)$ 在点 $\bar{x}$ 的下降方向.

又,设向量 $\boldsymbol{d}$ 与 $\nabla f(\bar{x})$ 之间的夹角为 θ,则有

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}=\|\nabla f(\bar{x})\|\cdot\|\boldsymbol{d}\|\cos\theta\geqslant-\|\nabla f(\bar{x})\|. \tag{3.1.8}$$

显然，当且仅当 $\theta=\pi, d=-\nabla f(\bar{x})$，(3.1.8)左边达到最小值，此时 d 为负梯度方向，负梯度方向是函数值(在 $\bar{x}$ 的邻域)下降最快的方向.

通常，将负梯度方向称为最速下降方向(steepest descent direction).

3.2 凸函数

3.2.1 凸函数的定义

定义 3.7 凸函数(convex function) 设函数 $f(x)$ 为定义在凸集 D 上的 n 元实函数. 如果任取 D 中的两个不同点 x_1, x_2，以及 $\lambda\in(0,1)$，都有

$$f(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2)\leqslant\lambda f(x_1)+(1-\lambda)f(x_2),$$

则称 $f(x)$ 是定义在凸集 D 上的凸函数.

如果任取 D 中的两个不同点 x_1, x_2，以及 $\lambda\in(0,1)$，都有

$$f(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2)<\lambda f(x_1)+(1-\lambda)f(x_2),$$

则称 $f(x)$ 是凸集 D 上的严格凸函数.

如果 $-f$ 为 D 上的凸函数，则称 f 为 D 上的凹函数.

凸函数的几何意义，可以用图 3.1 所示的一元凸函数来说明. 可以看出，当 $f(x)$ 是凸函数时，其图像 $y=f(x)$ 上任意两点 $(x_1, f(x_1))$，$(x_2, f(x_2))$ 之间的弧必在连接这两点的弦的下方.

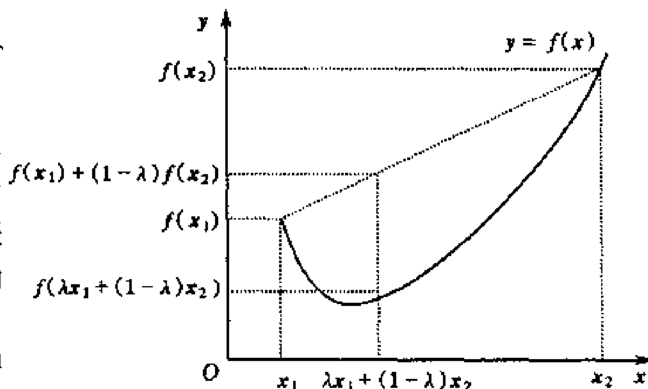


图 3.1

例 3.1 一元函数 $f(x)=|x|$ 是 E^1 上的凸函数.

解 因为对于任意的 $x_1, x_2\in E^1$，及每个数 $\lambda\in(0,1)$，均有

$$f(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2)=|\lambda x_1+(1-\lambda)x_2|\leqslant\lambda|x_1|+(1-\lambda)|x_2|$$

所以，由定义 3.7 知，$f(x)=|x|$ 为凸函数.

定理 3.3 设 f 是定义在凸集 D 上的凸函数，实数 $\lambda\geqslant0$，则 λf 也是定义在 D 上的凸函数.

定理 3.4 设 f_1 和 f_2 是定义在凸集 D 上的凸函数，则 f_1+f_2 也是定义在 D 上的凸函数.

推论 设 $f_1, f_2, \cdots, f_k$ 是定义在凸集 D 上的凸函数，实数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k\geqslant0$，则

$$\sum_{i=1}^{k}\lambda_i f_i$$

也是定义在 D 上的凸函数.

定义 3.8 α-水平集 设 $f(x)$ 是定义在集合 D 上的实函数，α 是实数，则称集合

$$S_\alpha=\{x\mid x\in D, f(x)\leqslant\alpha\}$$

是函数 $f(x)$ 的 α-水平集.

定理 3.5 设 D 是 E^n 中一个非空凸集，f 是定义在 D 上的凸函数，α 是一个实数，则水

平集 $S_\alpha=\{x\mid x\in D, f(x)\leqslant\alpha\}$是凸集.

证明 对于任意的 $x_1,x_2\in S_\alpha$,根据 S_α 的定义,有 $f(x_1)\leqslant\alpha, f(x_2)\leqslant\alpha$. 由于 D 为凸集,因此对每个数 $\lambda\in(0,1)$,必有

$$\lambda x_1+(1-\lambda)x_2\in D.$$

又由于 $f(x)$是 D 上的凸函数,则有

$$\begin{aligned}f(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2)&\leqslant\lambda f(x_1)+(1-\lambda)f(x_2)\\&\leqslant\lambda\alpha+(1-\lambda)\alpha=\alpha.\end{aligned}$$

因此 $\lambda x_1+(1-\lambda)x_2\in S_\alpha$,故 S_α 为凸集.

关于凸函数的连续性,不加证明地给出下列结论.

定理 3.6 设 D 是E^n 中一个内部非空的凸集,f 是定义在D 上的凸函数,则 f 在D 的内部连续.

值得注意的是,凸函数在定义域的边界有可能不连续.

3.2.2 凸函数的判别

当函数一阶或二阶可微时,除了可以根据定义判断其是否为凸(凹)函数外,更常用的办法是使用即将介绍的一阶和二阶判别条件.这些条件中,有的是充要条件,有的仅仅是充分条件,在使用时要注意条件的性质.

定理 3.7 凸函数的一阶充要条件 设 D 是E^n 中的非空开凸集,$f(x)$是定义在 D 上的可微函数.那么,$f(x)$是 D 上的凸函数的充要条件是:对 D 上任意两个不同点 x_1,x_2,恒有

$$f(x_2)\geqslant f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1). \tag{3.2.1}$$

证明 *必要性* 任取 $\lambda\in(0,1)$,则有

$$x_1+\lambda(x_2-x_1)=\lambda x_2+(1-\lambda)x_1\in D.$$

由一阶 Taylor 展式,有

$$f(x_1+\lambda(x_2-x_1))=f(x_1)+\lambda\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1)+o(\lambda).$$

而由 $f(x)$是 D 上的凸函数,又有

$$f(x_1+\lambda(x_2-x_1))=f(\lambda x_2+(1-\lambda)x_1)\leqslant\lambda f(x_2)+(1-\lambda)f(x_1).$$

两式联立,有

$$\lambda f(x_2)+(1-\lambda)f(x_1)\geqslant f(x_1)+\lambda\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1)+o(\lambda),$$

即

$$f(x_2)\geqslant f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1)+\frac{o(\lambda)}{\lambda}.$$

令 $\lambda\to0^+$,则有$\frac{o(\lambda)}{\lambda}\to0$,故

$$f(x_2)\geqslant f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1).$$

充分性 任取 $0<\lambda<1$,记

$$x=\lambda x_1+(1-\lambda)x_2.$$

由已知条件有

$$f(x_1)\geqslant f(x)+\nabla f(x)^{\mathrm T}(x_1-x),$$

$$f(x_2)\geqslant f(x)+\nabla f(x)^{\mathrm T}(x_2-x).$$

所以

$$\lambda f(x_1)\geqslant\lambda f(x)+\lambda\ \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(x_1-x),$$

$$(1-\lambda)f(x_2)\geqslant(1-\lambda)f(x)+(1-\lambda)\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(x_2-x).$$

两式相加,并进行整理,得

$$\lambda f(x_1)+(1-\lambda)f(x_2)\geqslant f(x)+\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2-x).$$

由于

$$x=\lambda x_1+(1-\lambda)x_2,$$

因此

$$\lambda f(x_1)+(1-\lambda)f(x_2)\geqslant f(x)=f(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2).$$

表明 $f(x)$是凸集 D 上的凸函数.

定理 3.7 的几何意义:设 $f(x)$是一元凸函数,x_1,x_2 是两个不同点,在点$(x_1,f(x_1))$作函数 $y=f(x)$的图像的切线,θ 为该切线与 x 轴方向的夹角(见图 3.2).由一元函数的导数的几何意义知

$$\nabla f(x_1)=f'(x_1)=\tan\theta.$$

从曲线 $y=f(x)$上的点$(x_2,f(x_2))$向 x 轴作垂线,则有

$$k=\tan\theta(x_2-x_1)=f'(x_1)(x_2-x_1),$$

$$f(x_2)\geqslant f(x_1)+k=f(x_1)+f'(x_1)(x_2-x_1).$$

由图 3.2 可知,对于凸函数,其图像上任一点的切线(或切平面)完全落在图像的下方,反之亦然.

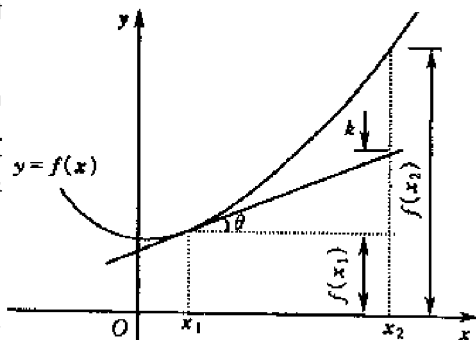


图 3.2

定理 3.8　严格凸函数的一阶充要条件　设 D 是 E^n 中的非空开凸集,$f(x)$是定义在 D 上的可微函数.那么,$f(x)$是 D 上的严格凸函数的充要条件是:对于任意两个相异点 $x_1,x_2\in D$,都有

$$f(x_2)>f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}(x_2-x_1).$$

证明　*充分性*　只需将定理 3.7 中关于充分性的证明中的"$\geqslant$"改为"$>$"即可.

必要性　设 $f(x)$是严格凸函数,则 $f(x)$也是凸函数.对于任意两个相异点 $x_1,x_2\in D$,取

$$x=\frac{1}{2}x_1+\frac{1}{2}x_2,$$

则 $x\in D$.

根据定理 3.7,必有

$$\begin{aligned}f(x)&\geqslant f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}(x-x_1)\\&=f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{2}x_1+\frac{1}{2}x_2-x_1\right)\\&=f(x_1)+\frac{1}{2}\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}(x_2-x_1).\end{aligned}\tag{3.2.2}$$

由于 $f(x)$是严格凸函数,则有

$$f(x)=f\left(\frac{1}{2}x_1+\frac{1}{2}x_2\right)<\frac{1}{2}f(x_1)+\frac{1}{2}f(x_2).\tag{3.2.3}$$

联立(3.2.2)和(3.2.3),得

$$\frac{1}{2}f(x_1)+\frac{1}{2}f(x_2)>f(x_1)+\frac{1}{2}\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}(x_2-x_1),$$

故

$$f(x_2)>f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm{T}}(x_2-x_1).$$

注意，由于极限运算对严格不等号不具备保号性，因此此处不能套用定理 3.7 中关于必要性的证明.

容易理解，若将定理 3.7 中的"≥"改为"≤"，将定理 3.8 中的"＞"改为"＜"，就是判断凹函数以及严格凹函数的一阶充要条件.

下面介绍判别函数凸(凹)性的二阶条件.

定理 3.9　凸函数的二阶充要条件　设 D 是 E^n 中的非空开凸集，$f(x)\in C^2$. 那么，$f(x)$ 是 D 上的凸函数的充要条件是：$f(x)$ 在每一点 $x\in D$ 处的 Hessian 矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 半正定.

证明　充分性　设对任一点 $x\in D$，$\nabla^2 f(x)$ 是半正定矩阵. 现任取 D 上两相异点 x_1，x_2，由 Taylor 展式，有

$$f(x_2)=f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1)+\frac{1}{2}(x_2-x_1)^{\mathrm T}\nabla^2 f(\bar x)(x_2-x_1).$$

其中，$\bar x=\lambda x_1+(1-\lambda)x_2$，$0\leqslant\lambda\leqslant 1$.

由于 D 是凸集，故 $\bar x\in D$，由已知条件，$\nabla^2 f(\bar x)$ 是半正定矩阵. 于是有

$$(x_2-x_1)^{\mathrm T}\nabla^2 f(\bar x)(x_2-x_1)\geqslant 0,$$

所以

$$f(x_2)\geqslant f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1),$$

根据定理 3.7，$f(x)$ 是 D 上的凸函数.

必要性　由于 D 是开集，故对 D 上任意点 x，以及任一给定的非零向量 y，总可以找到充分小的正数 λ，使得 $x+\lambda y\in D$. 由 Taylor 展式，有

$$f(x+\lambda y)=f(x)+\lambda\ \nabla f(x)^{\mathrm T}y+\frac{\lambda^2}{2}y^{\mathrm T}\nabla^2 f(\bar x)y+o(\lambda^2).$$

又由于 $f(x)$ 是 D 上的凸函数，由定理 3.7，有

$$f(x+\lambda y)\geqslant f(x)+\lambda\ \nabla f(x)^{\mathrm T}y.$$

因此

$$\frac{\lambda^2}{2}y^{\mathrm T}\nabla^2 f(\bar x)y+o(\lambda^2)\geqslant 0.$$

令 $\lambda\to 0^+$，则有 $\frac{o(\lambda^2)}{\lambda^2}\to 0$，则

$$y^{\mathrm T}\nabla^2 f(\bar x)y\geqslant 0,$$

所以 $\nabla^2 f(x)$ 是半正定矩阵.

对于严格凸函数，存在如下的二阶充分条件.

定理 3.10　严格凸函数的二阶充分条件　设 D 是 E^n 中的非空开凸集，$f(x)\in C^2$. 如果 $f(x)$ 在每一点 $x\in D$，Hessian 矩阵正定，那么，$f(x)$ 是严格凸函数.

此定理的证明可仿照定理 3.9. 特别要注意的是，逆定理并不成立. 若 $f(x)$ 是定义在 D 上的严格凸函数，则对于每一点 $x\in D$ 处，只能保证 Hessian 矩阵是半正定的，而不一定都是正定的.

例 3.2　设 $f(x)=x^4$，$x\in(-\infty,+\infty)$，任取两相异点 x_1，x_2，则有

$$\nabla f(x)=f'(x)=4x^3,$$

$$\begin{aligned}&f(x_2)-[f(x_1)+\nabla f(x_1)^{\mathrm T}(x_2-x_1)]\\&=x_2^4-x_1^4-4x_1^3(x_2-x_1)\\&=x_2^4-2x_1^2x_2^2+x_1^4+2x_1^2x_2^2-4x_1^3x_2+2x_1^4\\&=(x_1^2-x_2^2)^2+2x_1^2(x_1-x_2)^2>0.\end{aligned}$$

由定理 3.8,知 $f(x)$是严格凸函数.

但是,在 $x=0$处,有$\nabla^2 f(x)=f''(0)=0$,不是正定的.

推广 若 $f(x)$是二次函数,则当它的 Hessian 矩阵正定时,$f(x)$必是严格凸函数.

容易理解,若将定理 3.9 中的"半正定"改为"半负定",将定理 3.10 中的"正定"改为"负定",就得到了关于凹函数的二阶充要条件以及关于严格凹函数的二阶充分条件.

3.2.3 凸函数的极值

定理 3.11 凸函数在其定义域上的任一极小点都是其在定义域上的全局极小点,且全体极小点的集合是凸集.

证明 (见图 3.3)设 D 是E^n 中的非空开凸集,$f(x)$是定义在 D 上的凸函数. x^*是 $f(x)$在 D 上的一个局部极小点,由局部极小点的定义,应存在 x^*的一个邻域 $N(x^*,\delta)$,使得

$$f(x^*)\leqslant f(x),\ \forall x\in N(x^*,\delta)\cap D.$$

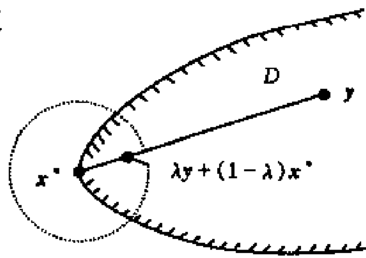


图 3.3

现任取 D 中一个点y,由于 D 是凸集,故

$$\lambda y+(1-\lambda)x^*\in D,\quad 0\leqslant\lambda\leqslant 1.$$

且当 $\lambda\leqslant\delta/\|x^*-y\|$时,满足

$$\|x^*-[\lambda y+(1-\lambda)x^*]\|=\lambda\|x^*-y\|\leqslant\delta,$$

即

$$\lambda y+(1-\lambda)x^*\in N(x^*,\delta)\cap D,$$
$$f(x^*)\leqslant f(\lambda y+(1-\lambda)x^*).$$

由于 $f(x)$是凸函数,又有

$$f(\lambda y+(1-\lambda)x^*)\leqslant\lambda f(y)+(1-\lambda)f(x^*),$$

因此

$$f(x^*)\leqslant\lambda f(y)+(1-\lambda)f(x^*),$$
$$f(x^*)\leqslant f(y).$$

所以,x^*是全局极小点.

又设 $f(x)$在 D 上的极小点的集合为S,则有

$$S=\{x\mid f(x)=f(x^*),x\in D\}.$$

记 $f(x^*)=\alpha$,则

$$S=S_\alpha,$$

即 S 是$f(x)$的 α-水平集.由定理 3.5,可知 S 是凸集.

定理 3.12 **凸函数极小点的充分条件** 设 D 是E^n 中的非空开凸集,$f(x)$是定义在 D 上的凸函数.且在点 $x^*\in D$ 存在梯度$\nabla f(x^*)$.如果对于任意点 $x\in D$,都有

$$\nabla f(x^*)^{\mathrm T}(x-x^*)\geqslant 0,$$

那么 x^*必是 $f(x)$在 D 上的全局极小点.

证明 因为 $f(x)$是 D 上的凸函数,由定理 3.7,对于任意点 $x\in D$,均应有

$$f(x)\geqslant f(x^*)+\nabla f(x^*)^{\mathrm T}(x-x^*).$$

而已知

$$\nabla f(x^*)^{\mathrm T}(x-x^*)\geqslant 0,$$

所以

$$f(x)\geqslant f(x^*),\ \forall x\in D.$$

推论 可微凸函数的任一驻点都是全局极小点.

图 3.4 给出了定理 3.12 的几何解释.

设 x^* 为 D 的边界点, $\nabla f(x^*)$ 非零, 对 D 上所有点 x, 都有

$$\nabla f(x^*)(x-x^*)\geqslant 0.$$

表明梯度 $\nabla f(x^*)$ 与向量 $x-x^*$ 的夹角 θ 为锐角或直角, 梯度 $\nabla f(x^*)$ 指向 D 的内部. 若以 $\nabla f(x^*)$ 为法向量作一条过 x^* 点的直线(或平面) π, 则 D 将完全落在 π 的同一侧, 表明 π 是 D 在 x^* 点的切线(切平面).

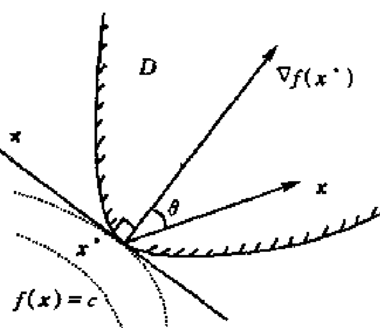


图 3.4

显然, π 也是函数 $f(x)$ 的等值线(面)在点 x^* 的切线(切平面), 所以表明 $f(x)$ 的等值线(面)与 D 在 x^* 点相切. 且由 $\nabla f(x^*)$ 指向 D 的内部, 所以 x^* 是 $f(x)$ 在 D 上的全局极小点.

3.2.4 凸规划(convex programming)

考虑如下的非线性规划问题:

$$\begin{aligned} \min\ & f(x), \\ \text{s.t.}\ & g_i(x)\leqslant 0, \quad i=1,2,\ldots,m, \\ & h_j(x)=0, \quad j=1,2,\cdots,l. \end{aligned}$$

其中, $f(x)$ 及 $g_i(x)$, $i=1,2,\cdots,m$ 都是 E^n 上的凸函数, $h_j(x)$ 是线性函数, 则这样的问题为凸规划问题.

显然, 若记凸规划的可行域为

$$D=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0, i=1,2,\cdots,m; h_j(x)=0, j=1,2,\cdots,l\},$$

则 D 必定是凸集. 其证明如下.

证明 记 $$D_i=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0, i=1,2,\cdots,m\},$$

则 D_i 是凸函数 $g_i(x)$ 的 0-水平集, 因而 D_i 是凸集.

线性函数 $h_j(x)$ 既是凸函数又是凹函数, 记

$$D_j=\{x\mid h_j(x)=0, j=1,2,\cdots,l\},$$

同理, D_j 是凸函数 $h_j(x)$ 的 0-水平集, 因而 D_j 也是凸集. D 是 $m+l$ 个凸集的交, 因此也是凸集.

由于凸规划可视为求凸函数 $f(x)$ 在其定义域 D 上的极小点问题, 由此可断言:

(1) 凸规划的任一驻点是极小点;

(2) 凸规划的任一极小点是全局最小点.

3.3 最优性条件

本节将研究非线性规划的最优解所满足的必要条件和充分条件. 这些条件十分重要, 将为各种算法的推导和分析提供不可或缺的理论基础.

3.3.1 无约束问题的最优性条件

考虑无约束非线性规划问题:

$$\min f(x), \quad x\in E^n.$$

其中,$f(x)$是定义在 E^n 上的实函数.

作为一元函数极值条件的自然推广,有如下的一阶必要条件.

定理 3.13 无约束极小点的一阶必要条件 设函数 $f(x)$在点 $\bar{x}$ 可微.若 $\bar{x}$ 是$f(x)$的无约束局部极小点,则必有梯度$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$.

证明 用反证法.设$\nabla f(\bar{x})\neq\mathbf{0}$,令方向 $\boldsymbol{d}=-\nabla f(\bar{x})$,则有

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}=-\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla f(\bar{x}))=-\|\nabla f(\bar{x})\|^2<0.$$

根据定理 3.2,必存在 $\delta>0$,使得当 $t\in(0,\delta)$时,有

$$f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})<f(\bar{x}).$$

这与 $\bar{x}$ 是局部极小点矛盾.所以假设不成立,$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$.

定理 3.14 无约束极小点的二阶必要条件 设 $f(x)$在 $\bar{x}$ 处二次可微,$\bar{x}$ 是$f(x)$的无约束局部极小点,则必有$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$,且 $f(x)$在 $\bar{x}$ 的 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(\bar{x})$半正定.

证明 因为 $\bar{x}$ 是$f(x)$的无约束局部极小点,故对任意非零向量 $\boldsymbol{d}$,存在充分小的正数 t,使

$$f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})\geqslant f(\bar{x}).$$

由二阶 Taylor 展式,可得

$$f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})=f(\bar{x})+t\,\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}+\frac{1}{2}t^2\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}+o(t^2).$$

又由定理 3.13,知

$$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}.$$

因此

$$\frac{1}{2}t^2\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}+o(t^2)\geqslant 0,$$

$$\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}+\frac{o(t^2)}{t^2}\geqslant 0.$$

令 $t\to 0$,有$\frac{o(t^2)}{t^2}\to 0$,有

$$\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}\geqslant 0,$$

表明 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(\bar{x})$半正定.

为深入讨论无约束极小点的充分条件,先不加证明地引入有关正定矩阵的引理.

引理 3.1 设 Q 是n 阶对称正定矩阵,λ_1,λ_n 分别是它的最小特征值和最大特征值.则对于任意的 n 元单位向量$\boldsymbol{d}$,都有

$$\lambda_1\leqslant\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}Q\boldsymbol{d}\leqslant\lambda_n.$$

定理 3.15 严格无约束局部极小点充分条件 设 $f(x)$在 $\bar{x}$ 处二次可微,若梯度$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$,且 $f(x)$在 $\bar{x}$ 的 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(\bar{x})$正定,则可断言 $\bar{x}$ 是严格局部极小点.

证明 因为$\nabla^2 f(\bar{x})$是正定矩阵,设其最小特征根为 λ,则必有 $\lambda>0$.由引理 3.1,对任意 n 元单位向量$\boldsymbol{d}$,都有

$$\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}\geqslant\lambda>0.$$

由于$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$,代入 Taylor 展式,有

$$\begin{aligned}f(\bar{x}+t\boldsymbol{d})-f(\bar{x})&=t\,\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}+\frac{1}{2}t^2\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}+o(t^2)\\&=\frac{1}{2}t^2\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})\boldsymbol{d}+o(t^2)\end{aligned}$$

$$\geqslant \frac{1}{2}\lambda t^2 + o(t^2).$$

存在充分小的正数 δ，当 $0<t<\delta$，有

$$\left|\frac{o(t^2)}{t^2}\right| < \frac{1}{2}\lambda,$$

故

$$\frac{1}{2}\lambda t^2 + o(t^2) > 0.$$

取 $\bar{x}$ 的 δ 邻域 $N(\bar{x},\delta)$，当 $0<t<\delta$，$\|d\|=1$ 时，有

$$f(\bar{x}+td)-f(\bar{x})>0,$$

所以 $\bar{x}$ 是 $f(x)$ 的无约束严格局部极小点.

需要强调的是，如果将定理 3.15 中的条件"Hessian 矩阵 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 正定"减弱为半正定，并不能相应得出 $\bar{x}$ 是(非严格)极小点的结论.

另外，由例 3.2 可知，虽然 $x=\mathbf{0}$ 是函数 $f(x)=x^4$ 的极小点，但该点的 Hessian 矩阵并非正定的. 这一反例表明，Hessian 矩阵正定并不是极小点的必要条件.

前面的几个定理分别给出无约束极值的必要条件和充分条件，这些条件都不是充要条件，而且利用这些条件只能研究局部极小点. 下面在函数的凸性假设中，给出全局极小点的充要条件.

定理 3.16 设 $f(x)$ 是定义在 E^n 上的可微凸函数，$\bar{x}\in E^n$，则 $\bar{x}$ 为全局极小点的充要条件是 $\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$.

证明 **必要性** 若 $\bar{x}$ 是全局极小点，自然是局部极小点，由定理 3.13 可知

$$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}.$$

充分性 设 $\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$，则对任意的 $x\in E^n$，有

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})=0.$$

由于 $f(x)$ 是可微凸函数，根据定理 3.7，有

$$f(x)\geqslant f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})=f(\bar{x}),$$

即 $\bar{x}$ 是全局极小点.

在上述定理中，如果 $f(x)$ 是严格凸函数，则全局极小点是唯一的.

上面介绍的几个极值条件，是针对极小化问题给出的. 对于极大化问题，可以给出类似的定理.

例 3.3 利用极值条件解下列问题：

$$\min \quad f(x)=\frac{1}{3}x_1^3+\frac{1}{3}x_2^3-x_2^2-x_1.$$

解 根据 $f(x)$ 的定义有

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}=x_1^2-1,\\[2mm] \dfrac{\partial f}{\partial x_2}=x_2^2-2x_2.\end{cases}$$

令 $\nabla f(x)=\mathbf{0}$，即

$$\begin{cases}x_1^2-1=0,\\ x_2^2-2x_2=0\end{cases}.$$

解此方程组，得到驻点

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad x^{(2)}=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix},\quad x^{(3)}=\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix},\quad x^{(4)}=\begin{pmatrix}-1\\2\end{pmatrix}.$$

函数 $f(x)$的 Hessian 矩阵

$$\nabla^2 f(x)=\begin{pmatrix}2x_1 & 0\\0 & 2x_2-2\end{pmatrix}.$$

由此可知,在点 $x^{(1)},x^{(2)},x^{(3)},x^{(4)}$处的 Hessian 矩阵依次为

$$\nabla^2 f(x^{(1)})=\begin{pmatrix}2 & 0\\0 & -2\end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 f(x^{(2)})=\begin{pmatrix}2 & 0\\0 & 2\end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 f(x^{(3)})=\begin{pmatrix}-2 & 0\\0 & -2\end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 f(x^{(4)})=\begin{pmatrix}-2 & 0\\0 & 2\end{pmatrix}.$$

由于矩阵$\nabla^2 f(x^{(1)})$, $\nabla^2 f(x^{(4)})$不定,根据定理 3.14, $x^{(1)}$和 $x^{(4)}$不是极小点. 矩阵$\nabla^2 f(x^{(3)})$负定,因此 $x^{(3)}$也不是极小点,实际上它是极大点. 矩阵$\nabla^2 f(x^{(2)})$正定,根据定理 3.15, $x^{(2)}$是严格局部极小点.

例 3.4 利用极值条件解下列问题:

$$\min \quad f(x)=(x_1^2-1)^2+x_1^2+x_2^2-2x_1.$$

解 根据 $f(x)$的定义有

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}=4x_1^3-2x_1-2,\\[2mm]\dfrac{\partial f}{\partial x_2}=2x_2.\end{cases}$$

令$\nabla f(x)=\mathbf{0}$,即

$$\begin{cases}4x_1^3-2x_1-2=0,\\2x_2=0,\end{cases}$$

解此方程组,得到驻点

$$\bar{x}=(\bar{x}_1,\bar{x}_2)^{\mathrm{T}}=(1,0)^{\mathrm{T}}.$$

再利用极值条件判断 $\bar{x}$ 是否为极小点. 由于目标函数的 Hessian 矩阵为

$$\nabla^2 f(x)=\begin{pmatrix}12x_1^2-2 & 0\\0 & 2\end{pmatrix},$$

由此可知

$$\nabla^2 f(\bar{x})=\begin{pmatrix}10 & 0\\0 & 2\end{pmatrix}.$$

显然$\nabla^2 f(\bar{x})$为正定矩阵,根据定理 3.15,驻点 $\bar{x}=(1,0)^{\mathrm{T}}$是局部极小点.

为了对无约束极小点有更直观的理解,以助于以后对算法的理解,将进一步讨论函数 $f(x)$在极小点及其附近的等值线(面)的几何特征.

定理 3.17 函数在无约束极小点附近的等值面族是近似的椭球族.

证明 设 $\bar{x}$ 是$f(x)$的无约束极小点, $f(x)=c$ 是充分靠近$\bar{x}$ 的一个等值面,显然,

$$c\geqslant f(\bar{x}).$$

因为 $\bar{x}$ 是$f(x)$的无约束极小点,所以$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$, $\nabla^2 f(\bar{x})$半正定.由 Taylor 展式,有

$$f(x)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x})+o(\|x-\bar{x}\|^2),$$

略去式中的高阶无穷小项,注意到$\nabla f(\bar{x})=\mathbf{0}$,有

$$f(x)\approx f(\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x}),$$

即近似地有

$$\frac{1}{2}(x-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x})=f(x)-f(\bar{x})=c-f(\bar{x})\geqslant 0.$$

由于$\nabla^2 f(\bar{x})$半正定,根据解析几何知道,上式是以 $\bar{x}$ 为中心的椭球面方程.

这一结论具有普遍的意义,如果看一下地图上的等高线(即地面海拔高度的等值线),可以发现,在山峰顶(局部最高点)及谷底(局部最低点)的附近,等高线是近似的椭圆.

3.3.2 约束问题的最优性条件

考虑约束非线性规划问题:

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f(x),\\ \mathrm{s.t.} & g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m,\\ & h_j(x)=0,\ j=1,2,\cdots,l.\end{array}\right\}\qquad(3.3.1)$$

其可行域记为 D.

定义 3.9　关于点 $\bar{x}$ 的积极(active)约束　设 $\bar{x}$ 是问题(3.3.1)的可行点,若对某个 i,有 $g_i(\bar{x})=0$,则称相应的约束 $g_i(x)\leqslant 0$ 是关于点 $\bar{x}$ 的积极约束,或称之为在点 $\bar{x}$ 处起作用的约束;若满足 $g_i(x)<0$,则称相应的约束为关于点 $\bar{x}$ 的不积极(inactive)约束,或称之为在点 $\bar{x}$ 处不起作用的约束.

显然,对于可行点,任一等式约束均为积极约束.

积极约束在 $\bar{x}$ 的邻域限制了可行点的范围,也就是说,当点沿着某些方向稍微偏离 $\bar{x}$ 时,仍能满足这些约束条件,而沿着另一些方向离开 $\bar{x}$ 时,不论步长多么小,都将违背这些约束条件.对于不积极约束,情形则不同,当点稍微离开 $\bar{x}$ 时,不论沿着什么方向,都不会违背这些约束.

研究在一点处的可行方向时,只需考虑在这一点的积极约束,可以暂时不管那些不积极约束.

定义 3.10　可行方向(feasible direction)　设 D 是可行域,点 $\bar{x}\in D$.若对某个给定的非零向量 d,存在正数 $\varepsilon>0$,使得当 t 为小于ε 的正数时,都有

$$\bar{x}+td\in D,\quad 0\leqslant t\leqslant\varepsilon,$$

则称 d 是可行域D 的从$\bar{x}$ 出发的一个可行方向.

图 3.5 中显示了可行域 D 关于$\bar{x}$ 的 2 个可行方向 d_1,d_2 以及关于点 x'的不可行方向 d_3,在讨论可行方向时,还常常涉及锥的概念.

定义 3.11　锥　设 S 是一个非空集合,$\bar{x}\in S$.如果对于向量 d,只要有 $\bar{x}+d\in S$,就必有

$$\bar{x}+td\in S,\quad\forall t\geqslant 0,$$

则称集合 S 是一个锥,而称点 $\bar{x}$ 为S 的顶点.

容易证明,从同一点 $\bar{x}$ 出发的所有可行方向向量的集合是一个顶点为 $\bar{x}$ 的锥,这个锥称为点 $\bar{x}$ 的可行方向锥.可行方向锥的几何解释如图 3.6 所示.设 D 是可行域,$\bar{x}\in D$,d_1,d_2 是 D 的两条边界曲线在 $\bar{x}$ 处的切向量,则以 $\bar{x}$ 为出发点,向量 d_1,d_2 张成一个顶点为 $\bar{x}$ 的锥,这个锥中除了形如向量 td_1,td_2 以外所有向量都是 $\bar{x}$ 点的可行方向.显然,从上述的锥中去掉向量 $td_1,td_2(t>0)$ 以后仍是一个锥,即 $\bar{x}$ 处的可行方向锥.

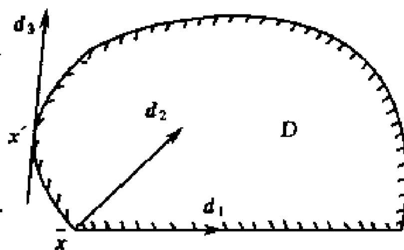


图 3.5

3.3.2.1 等式约束问题的最优性条件

设等式约束问题为

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f(x),\\ \text{s.t.} & h_j(x)=0,\quad j=1,2,\cdots,l.\end{array}\right\}\qquad(3.3.2)$$

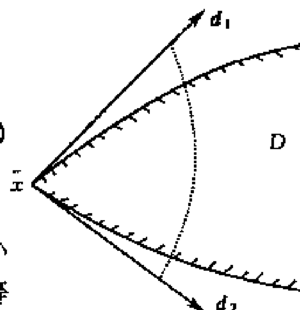


图 3.6

首先不加证明地引入 Lagrange 定理.

定理 3.18 Lagrange 定理 设 $\bar{x}$ 是问题(3.3.2)的局部极小点,$f(x)$以及 $h_j(x)(j=1,2,\cdots,l)$在 $\bar{x}$ 的邻域连续可微,且所有等式约束函数在 $\bar{x}$ 的梯度$\nabla h_1(\bar{x}),\cdots,\nabla h_l(\bar{x})$线性无关.那么,存在 l 个数,$\bar{\lambda}_1,\cdots,\bar{\lambda}_l$,使得

$$\nabla f(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}\bar{\lambda}_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}.\qquad(3.3.3)$$

Lagrange 定理实质是将等式约束问题转化为无约束问题来处理.引入定义在 $n+l$ 维向量空间上的 Lagrange 函数

$$L(x,\lambda_1,\cdots,\lambda_l)=f(x)+\sum_{j=1}^{l}\lambda_j h_j(x).$$

如果 $\bar{x}$ 是 Lagrange 函数的无约束极小点,则 Lagrange 函数 $L(x,\lambda)$在$(\bar{x},\bar{\lambda})$的梯度应为 $n+l$ 维的零向量.

$$\nabla L(\bar{x},\bar{\lambda})=\begin{pmatrix}\nabla_x L(\bar{x},\bar{\lambda})\\ \nabla_\lambda L(\bar{x},\bar{\lambda})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix}.$$

其中,$\bar{\lambda}=(\bar{\lambda}_1,\cdots,\bar{\lambda}_l)^{\mathrm{T}}$是Lagrange乘子.注意到

$$\begin{cases}\nabla_x L(\bar{x},\bar{\lambda})=\nabla f(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}\bar{\lambda}_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}\\ \nabla_\lambda L(\bar{x},\bar{\lambda})=h_j(\bar{x})=\mathbf{0}.\end{cases}$$

即得 Lagrange 定理中的必要条件.

由于(3.3.3)仅仅是等式约束问题极小点的一个必要条件,因此,当找到了满足Lagrange条件(3.3.3)的点 $\bar{x}$ 之后,还应结合其他条件才能判断 $\bar{x}$ 是否真为极小点.下面不加证明地给出判断严格局部极小点的充分条件.

定理 3.19 Lagrange 充分条件 如果在等式约束问题(3.3.2)中,点 $\bar{x}$ 满足如下三个条件:

(1) $f(x),h_1(x),\cdots,h_l(x)$为 E^n 中的二次连续可微函数;

(2) 存在 $\bar{\lambda}\in E^l$,使$\nabla L(\bar{x},\bar{\lambda})=\mathbf{0}$;

(3) 对 E^n 中的非零向量$\boldsymbol{d}$,如果有

$$d^{\mathrm{T}}\nabla h_j(\bar{x})=0, \quad j=1,2,\cdots,l,$$

必有

$$d^{\mathrm{T}}\nabla_x^2 L(\bar{x},\bar{\lambda})d>0,$$

则 $\bar{x}$ 是严格局部极小点.

例 3.5 应用 Lagrange 条件求解：

$$\begin{aligned} &\min \quad f(x)=-x_1x_2,\\ &\text{s.t.} \quad x_1+x_2-1=0. \end{aligned}$$

解 先构造 Lagrange 函数，得

$$\begin{aligned} &L(x_1,x_2,\lambda)=-x_1x_2+\lambda(x_1+x_2-1),\\ &\frac{\partial L}{\partial x_1}=-x_2+\lambda,\\ &\frac{\partial L}{\partial x_2}=-x_1+\lambda,\\ &\frac{\partial L}{\partial \lambda}=x_1+x_2-1. \end{aligned}$$

令 $\nabla L(x_1,x_2,\lambda)=\mathbf{0}$，得

$$\bar{x}_1=\bar{x}_2=\frac{1}{2}, \quad \bar{\lambda}=\frac{1}{2}.$$

下面再验证 Lagrange 充分条件是否满足，经计算，有

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x_1^2}=0, \frac{\partial^2 L}{\partial x_1\partial x_2}=-1, \frac{\partial^2 L}{\partial x_2\partial x_1}=-1, \frac{\partial^2 L}{\partial x_2^2}=0.$$

$$\nabla_x^2 L(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{\lambda})=\begin{pmatrix} 0 & -1\\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

设非零向量 $d=(d_1,d_2)^{\mathrm{T}}$，满足

$$d^{\mathrm{T}}\nabla h(\bar{x})=0.$$

因为

$$\begin{aligned} &h(x)=x_1+x_2-1,\\ &\nabla h(x)=(1,1)^{\mathrm{T}}. \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} &(d_1,d_2)\begin{pmatrix} 1\\ 1 \end{pmatrix}=0,\\ &d_1=-d_2\neq 0,\\ &d^{\mathrm{T}}\nabla_x^2 L(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{\lambda})d=(d_1,d_2)\begin{pmatrix} 0 & -1\\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1\\ d_2 \end{pmatrix}\\ &\qquad =-2d_1d_2=2d_1^2>0. \end{aligned}$$

表明，点 $\bar{x}=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)^{\mathrm{T}}$ 满足严格极小点的充分条件，因而是原问题的严格局部极小点.

3.3.2.2 不等式约束问题的最优性条件

设问题为

$$\left.\begin{aligned} &\min \quad f(x),\\ &\text{s.t.} \quad g_i(x)\leqslant 0, \quad i=1,2,\cdots,m. \end{aligned}\right\} \tag{3.3.4}$$

为讨论方便，先引入几个记号：

$$D=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m\},$$
$$I=\{i\mid g_i(\bar{x})=0,\ i=1,2,\cdots,m\},$$
$$S=\{d\mid d\text{ 是}D\text{ 的从}\bar{x}\text{ 出发的可行方向}\},$$
$$F_0=\{d\mid \nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0,\ d\in E^n\}.$$

其中,D 是可行域,$\bar{x}\in D$ 是可行点,I 就是关于可行点的积极约束的下标的集合,S 就是顶点在$\bar{x}$ 的可行方向锥.F_0 的元素全部是 $f(x)$在 $\bar{x}$ 点的下降方向,但不一定包含了全部下降方向,因为与目标函数的梯度正交的方向也有可能是下降方向.

定理 3.20 几何最优性条件 设在不等式约束问题(3.3.4)中,目标函数 $f(x)$可微,且 $\bar{x}$ 是局部极小点,则有

$$F_0\cap S=\varnothing.$$

证明 若 $F_0\cap S\neq\varnothing$,则存在非零向量 d,使

$$d\in F_0\cap S.$$

因为 $d\in F_0$,故$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0$,$d$ 是$f(x)$在 $\bar{x}$ 的下降方向,于是存在正数 $\varepsilon_1>0$,当 $t\in(0,\varepsilon_1)$时,有

$$f(\bar{x}+td)<f(\bar{x}),$$

且 $d\in S$,故 d 是D 在$\bar{x}$ 的可行方向.存在正数 $\varepsilon_2>0$,当 $t\in(0,\varepsilon_2)$时,有

$$\bar{x}+td\in D.$$

现取 $\varepsilon=\min\{\varepsilon_1,\varepsilon_2\}$,则当 $t\in(0,\varepsilon)$时,同时满足

$$\begin{cases}\bar{x}+td\in D,\\ f(\bar{x}+td)<f(\bar{x}).\end{cases}$$

表明 $\bar{x}$ 不是原问题的局部极小点,与已知条件相矛盾.所以必有

$$F_0\cap S=\varnothing.$$

几何最优性条件是不等式约束条件下极小点的必要条件.现以二维情形为例说明几何最优性条件的几何解释.

在图 3.7 中,$\bar{x}$ 是可行点,S 是以$\bar{x}$ 为顶点的锥(这个锥由向量 d_1,d_2 生成).目标函数 $f(x)$在 $\bar{x}$ 的负梯度方向指向D 的外部,过 $\bar{x}$ 作与 $-\nabla f(\bar{x})$正交的直线 L,以该直线 L 为界的左半平面(不包括直线 L)即集合 F_0,显然,当 $\bar{x}$ 是极小点时,从 $\bar{x}$ 出发的任一向量都不可能既落在F_0 内又同时落在 S 内.

由于可行方向集 S 不一定可以写出明确的表达式,因而几何最优性条件在使用时不太方便.但是,如果约束函数 $g_i(x)$是可微的,那么可以利用约束函数的梯度来寻找可行方向.

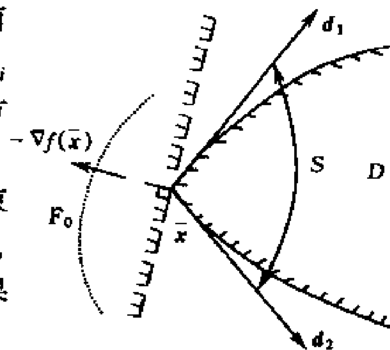


图 3.7

定理 3.21 可行方向的充分条件 设 $\bar{x}$ 是不等式约束问题(3.3.4)的可行点,I 是关于点$\bar{x}$ 的积极约束的指标集,且当 $i\in I$ 时,$g_i(x)$在 $\bar{x}$ 可微;当 $i\notin I$,$g_i(x)$在 $\bar{x}$ 连续.如果对所有的 $i\in I$,都有

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0,\quad i\in I,$$

则 d 是可行域D 在点$\bar{x}$ 的可行方向.

证明 由$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0$,$i\in I$,有 d 是函数$g_i(x)$在点 $\bar{x}$ 的下降方向,$i\in I$.因此存在

$\varepsilon_i>0$，当 $t\in(0,\varepsilon_i)$时，有

$$g_i(\bar{x}+td)<g_i(\bar{x})=0,\quad i\in I.$$

而当 $i\notin I$ 时，由 I 的定义，知

$$g_i(\bar{x})<0,\quad i\notin I.$$

因为 $g_i(x)$在 $\bar{x}$ 处连续，所以存在 $\varepsilon_i>0$，当 $t\in(0,\varepsilon_i)$时，也有

$$g_i(\bar{x}+td)<0,\quad i\notin I.$$

取 $\varepsilon=\min\{\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m\}$，则当 $t\in(0,\varepsilon)$时，有

$$g_i(\bar{x}+td)<0,\quad i=1,2,\cdots,m.$$

由可行方向的定义，d 是 $\bar{x}$ 点的可行方向.

引入记号

$$S_0=\{d\mid\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0, i\in I\}.$$

定理 3.22 设点 $\bar{x}$ 是不等式约束问题(3.3.4)的局部极小点，$f(x)$，$g_i(x)(i\in I)$在 $\bar{x}$ 可微，且当 $i\notin I$，$g_i(x)$在 $\bar{x}$ 连续，则必有

$$S_0\cap F_0=\varnothing.$$

证明 显然，$S_0\subset S$，而由定理 3.20，有 $F_0\cap S=\varnothing$.所以

$$F_0\cap S_0=\varnothing.$$

定理 3.23 Fritz John 定理 设 $\bar{x}$ 是不等式约束问题(3.3.4)的局部极小点，$f(x)$，$g_i(x)(i\in I)$在 $\bar{x}$ 可微，且对 $i\notin I$，$g_i(x)$在 $\bar{x}$ 连续，那么，存在不全为零的数 u_0，$u_i(i\in I)$，使得

$$\begin{cases}u_0\nabla f(\bar{x})+\sum\limits_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})=\mathbf{0},\quad i=1,2,\cdots,m,\\ u_0,u_i\geqslant 0.\\ u_0,u_i\text{ 不全为零},\quad i\in I\end{cases}$$

特别地，若所有的 $g_i(x)$在 $\bar{x}$ 处可微，则有

$$\begin{cases}u_0\nabla f(\bar{x})+\sum\limits_{i=1}^{m}u_i\nabla g_i(\bar{x})=\mathbf{0},\quad i=1,2,\cdots,m,\\ u_ig_i(\bar{x})=0,\quad i=1,2,\cdots,m,\\ u_0,u_i\geqslant 0,\\ u_0,u_i\text{ 不全为零},\quad i=1,2,\cdots,m.\end{cases}$$

证明 因为 $\bar{x}$ 是极小点，由定理 3.22，有 $F_0\cap S_0=\varnothing$，即不存在向量 d，使下列两式同时成立：

$$\begin{cases}\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0,\\ \nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d<0,\quad i\in I.\end{cases}$$

现以$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}$，$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(i\in I)$为行向量构造矩阵 A，则不可能存在向量 d，使得

$$Ad<\mathbf{0},\quad d\in E^n.$$

由 Gorden 定理，必存在非零向量 u，使得

$$A^{\mathrm{T}}u=\mathbf{0},\ u\geqslant\mathbf{0}.$$

记 u 的分量为 u_0，$u_i(i\in I)$，将上式展开，即得

$$\begin{cases} u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum\limits_{i\in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0, \\ u_0, u_i \geqslant 0, \quad i \in I, \\ u_0, u_i \text{ 不全为零}, \quad i \in I. \end{cases}$$

特别地，若当 $i \notin I$ 时，也有 $g_i(x)$ 在 $\bar{x}$ 处可微，则可令

$$u_i = 0, \quad i \notin I.$$

由 $g_i(\bar{x}) = 0, i \in I$，有

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = \mathbf{0}.$$

即得

$$\begin{cases} u_i g_i(\bar{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \\ u_0, u_i \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \\ u_0, u_i \text{ 不全为零}. \end{cases}$$

通常，也称 $u_0, u_1, \cdots, u_m$ 为 Lagrange 乘子，称表达式"$u_i g_i(\bar{x}) = 0$"为互补松弛条件，称 Fritz John 定理所推出的必要条件为 Fritz John 条件，而把满足 Fritz John 条件的点称为 Fritz John 点.

例 3.6 给定非线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_2, \\ \text{s.t.} \quad & g_1(x) = 2x_1 - (2 - x_2)^3 \leqslant 0, \\ & g_2(x) = -x_1 \leqslant 0. \end{aligned}$$

验证在点 $\bar{x} = (0, 2)^{\mathrm{T}}$ 处 Fritz John 条件成立.

在点 $\bar{x} = (0, 2)^{\mathrm{T}}$ 处，两个约束都是积极约束. 目标函数及约束函数的梯度分别为

$$\nabla f(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \nabla g_1(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \nabla g_2(\bar{x}) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

设

$$u_0 \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} + u_1 \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

即

$$\begin{cases} 2u_1 - u_2 = 0, \\ u_0 = 0. \end{cases}$$

解此方程组，得到

$$(u_0, u_1, u_2) = (0, k, 2k),$$

k 可取任何正数，因此在 $\bar{x}$ 处 Fritz John 条件成立.

例 3.6 表明，运用 Fritz John 条件时，可能出现 $u_0 = 0$ 的情形. 这时，Fritz John 条件中便失去了 $\nabla f(\bar{x})$，而没有目标函数的任何信息，只是把积极约束的梯度组合成零向量. 这样的条件，对于描述问题的解，没有多少价值. 有应用价值的是 $u_0 \neq 0$ 的情形. 为保证 $u_0 \neq 0$，还需要对约束施加某种限制. 这种限制条件通常称为约束规格(constraint qualification). 在定理 3.23 中，如果增加积极约束的梯度线性无关的约束规格，则给出不等式约束问题的著名的 Kuhn-Tucker 条件.

定理 3.24 Kuhn-Tucker 定理 设 $\bar{x}$ 是不等式约束问题(3.3.4)的局部极小点，$f(x)$，$g_i(x)(i \in I)$ 在 $\bar{x}$ 处可微，且当 $i \notin I$ 时，$g_i(x)$ 在 $\bar{x}$ 处连续. 如果对于 $i \in I$，向量组 $\nabla g_i(\bar{x})$，$i \in I$ 线性无关，那么存在数 $u_i (i \in I)$，使得

$$\left.\begin{aligned}&\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i\in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0,\\&u_i \geqslant 0,\quad i \in I.\end{aligned}\right\}\tag{3.3.5}$$

特别地,若当 $i \notin I$ 时,也有 $g_i(x)$在 $\bar{x}$ 处可微,则有

$$\left.\begin{aligned}&\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0,\\&u_i g_i(\bar{x}) = 0,\quad i = 1,2,\cdots,m,\\&u_i \geqslant 0,\quad i = 1,2,\cdots,m.\end{aligned}\right\}\tag{3.3.6}$$

证明 根据定理 3.23,存在不全为零的数 $u_0, u_i(i\in I)$,使得

$$u_0 \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i\in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0.$$

显然,$u_0 \neq 0$.若 $u_0 = 0$,则有

$$\sum_{i\in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0.$$

由于向量组$\nabla g_i(\bar{x})$线性无关,则必有 $u_i = 0(i\in I)$.这与 Fritz John 条件相矛盾,故(3.3.5)成立.同理可证,(3.3.6)成立.

Kuhn-Tucker 定理简称为 K-T 定理,称所导出的有关极小点的必要条件为 K-T 条件,满足 K-T 条件的点称为 K-T 点.

K-T 条件(3.3.5)等价于

$$\begin{cases}-\nabla f(\bar{x}) = \sum_{i\in I} u_i \nabla g_i(\bar{x}),\\u_i \geqslant 0,\quad i \in I.\end{cases}$$

表明目标函数 $f(x)$在 $\bar{x}$ 处的负梯度落在积极约束在$\bar{x}$ 处的梯度所生成的锥里(顶点在 $\bar{x}$).

例 3.7 给定非线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & (x_1-2)^2 + x_2^2,\\ \text{s.t.}\quad & -x_1 + x_2^2 \leqslant 0,\\ & x_1 - x_2 \leqslant 0.\end{aligned}$$

验证下列两点

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix} \text{和 } x^{(2)} = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

是否为 K-T 点.

解 记

$$\begin{cases}f(x) = (x_1-2)^2 + x_2^2,\\g_1(x) = -x_1 + x_2^2,\\g_2(x) = x_1 - x_2.\end{cases}$$

目标函数和约束函数的梯度是

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix}2(x_1-2)\\2x_2\end{pmatrix},\ \nabla g_1(x) = \begin{pmatrix}-1\\2x_2\end{pmatrix},\ \nabla g_2(x) = \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

对于 $x^{(1)} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$,在这一点,$g_1(x)\leqslant 0$ 和 $g_2(x)\leqslant 0$ 都是积极约束,目标函数和约束函数的梯度分别是

$$\nabla f(x^{(1)})=\begin{pmatrix}-4\\0\end{pmatrix},\nabla g_1(x^{(1)})=\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix},\nabla g_2(x^{(1)})=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

且$\nabla g_1(x^{(1)})$, $\nabla g_2(x^{(1)})$线性无关.

设
$$\begin{pmatrix}-4\\0\end{pmatrix}+u_1\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix}+u_2\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$

即
$$\begin{cases}-4-u_1+u_2=0,\\ \qquad\quad -u_2=0.\end{cases}$$

解此方程组,得
$$u_1=-4,u_2=0.$$

由于 $u_1<0$,因此 $x^{(1)}$不是 K-T 点.

对于 $x^{(2)}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$,在点 $x^{(2)}$, $g_1(x)\leqslant 0$ 和 $g_2(x)\leqslant 0$ 都是积极约束,目标函数和约束函数的梯度分别为

$$\nabla f(x^{(2)})=\begin{pmatrix}-2\\2\end{pmatrix},\nabla g_1(x^{(2)})=\begin{pmatrix}-1\\2\end{pmatrix},\nabla g_2(x^{(2)})=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

且$\nabla g_1(x^{(2)})$, $\nabla g_2(x^{(2)})$线性无关.

设
$$\begin{pmatrix}-2\\2\end{pmatrix}+u_1\begin{pmatrix}-1\\2\end{pmatrix}+u_2\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$

即
$$\begin{cases}-2-u_1+u_2=0,\\ 2+2u_1-u_2=0.\end{cases}$$

解此方程组,得
$$u_1=0,u_2=2.$$

所以 $x^{(2)}$是 K-T 点.

例 3.8 给定非线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x)=(x_1-1)^2+x_2,\\ \text{s.t.}\quad & g_1(x)=x_1+x_2-2\leqslant 0,\\ & g_2(x)=\quad -x_2\quad\leqslant 0.\end{aligned}$$

求满足 K-T 条件的点.

解 目标函数和约束函数的梯度分别为

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}2(x_1-1)\\1\end{pmatrix},\nabla g_1(x)=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\nabla g_2(x)=\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}.$$

K-T 条件为

$$\begin{cases}\nabla f(x)+\sum\limits_{i\in I}u_i\nabla g_i(x)=0,\\ u_ig_i(x)=0,\quad i=1,2,\\ u_i\geqslant 0,\quad i=1,2.\end{cases}$$

即

$$\begin{cases} 2(x_1-1)+u_1=0, & (1)\\ 1+u_1-u_2=0, & (2)\\ u_1(x_1+x_2-2)=0, & (3)\\ u_2(-x_2)=0, & (4)\\ u_1,u_2\geqslant 0. & (5) \end{cases}$$

式(1)~(4)是以 x_1,x_2,u_1,u_2 为元的非线性方程组,问题归结为求这个方程组满足条件 $u_1\geqslant 0$ 和 $u_2\geqslant 0$ 的解.一般说来,求解非线性方程组比较复杂,但求解这个问题却比较简单.

在式(4)中,若 $u_2=0$,则由式(2)得到 $u_1=-1$,因此设 $x_2=0$,则方程组变成

$$\begin{cases} 2x_1+u_1-2=0, & (6)\\ u_1-u_2+1=0, & (7)\\ u_1(x_1-2)=0. & (8) \end{cases}$$

在式(8)中,若 $x_1-2=0$,则由式(6)必得 $u_1=-2$,因此设 $u_1=0$.再将 $u_1=0$ 代入式(6)和式(7),解得 $u_2=1,x_1=1$.

由上述求解过程得到原方程组的一组解:

$$x_1=1,\ x_2=0,\ u_1=0,\ u_2=1.$$

由于 u_1 和 u_2 都是非负数,因此得到 K-T 点,有

$$\bar{x}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

定理 3.25 极小点充分条件 设极小化问题(3.3.4)是凸规划,$\bar{x}$ 是一个 K-T 点,那么,$\bar{x}$ 必是全局极小点.

证明 任取一个可行点 x,那么,$g_i(x)\leqslant 0$;又由于约束函数 $g_i(x)$ 是凸函数,则有

$$g_i(x)\geqslant g_i(\bar{x})+\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}),\quad i=1,2,\cdots,m.$$

当 $i\in I,g_i(\bar{x})=0$ 时,有

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})\leqslant 0.$$

由 $\bar{x}$ 是 K-T 点,有

$$\nabla f(\bar{x})=-\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x}),\quad u_i\geqslant 0,\quad i\in I,$$

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})=-\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})\geqslant 0.$$

因 $f(x)$ 是凸函数,所以

$$f(x)\geqslant f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}),$$
$$f(x)\geqslant f(\bar{x}).$$

这表明,$\bar{x}$ 是原问题的全局极小点.

此定理要求在凸规划的情况下才成立,对于非凸规划,K-T 点可能不是极小点.

3.3.2.3 一般约束问题的一阶最优性条件

设具有等式和不等式约束的问题为

$$\left.\begin{aligned} \min\quad & f(x),\\ \text{s.t.}\quad & g_i(x)\leqslant 0,\quad i=1,2,\cdots,m,\\ & h_j(x)=0,\quad j=1,2,\cdots,l. \end{aligned}\right\}\qquad(3.3.7)$$

定义集合

$$H_0=\{d \mid \nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}} d=0, j=1,\cdots,l\}.$$

可以证明，当$\nabla h_1(\bar{x}), \nabla h_2(\bar{x}), \cdots, \nabla h_l(\bar{x})$线性无关时，$H_0$ 等于等式约束

$$\begin{cases} h_1(x)=0, \\ h_2(x)=0, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ h_l(x)=0 \end{cases}$$

所定义的超曲面在 $\bar{x}$ 处的切平面.

定理 3.26 设在问题(3.3.7)中，$\bar{x}$ 为可行点，$I=\{i \mid g_i(\bar{x})=0\}$，$f$ 和 $g_i(i \in I)$在点 $\bar{x}$ 可微，$g_i(i \notin I)$在点 $\bar{x}$ 连续，$h_j(j=1,\cdots,l)$在点 $\bar{x}$ 连续可微，且 $\nabla h_1(\bar{x}), \nabla h_2(\bar{x}), \cdots, \nabla h_l(\bar{x})$ 线性无关.如果 $\bar{x}$ 是局部最优解，则在 $\bar{x}$ 处，有

$$F_0 \cap G_0 \cap H_0=\varnothing.$$

其中，F_0 和 G_0 的定义为

$$\begin{cases} F_0=\{d \mid \nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}} d<0\}, \\ G_0=\{d \mid \nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} d<0, i \in I\}. \end{cases}$$

证明 用反证法.设存在向量

$$y \in F_0 \cap G_0 \cap H_0,$$

即下列各式同时成立：

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}} y<0, \tag{3.3.8}$$

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} y<0, \quad i \in I, \tag{3.3.9}$$

$$\nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}} y=0, \quad j=1,\cdots,l. \tag{3.3.10}$$

现用微分方程及边界条件

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}\alpha(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=\boldsymbol{P}(\lambda) y, \\ &\alpha(0)=\bar{x}. \end{aligned}\right\} \tag{3.3.11}$$

定义一个函数 $\alpha: E^1 \rightarrow E^n$.其中 $\lambda \geqslant 0$，取 $\boldsymbol{P}(\lambda)$为这样的矩阵，它把任何向量 $z \in E^n$ 投影到矩阵

$$\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial x}=(\nabla h_1(x), \nabla h_2(x), \cdots, \nabla h_l(x))^{\mathrm{T}}$$

的零空间，即对任意的 $z \in E^n$，总成立

$$\frac{\partial \boldsymbol{h}(\alpha(\lambda))}{\partial x} \boldsymbol{P}(\lambda) z=0.$$

由于矩阵$\dfrac{\partial \boldsymbol{h}(\bar{x})}{\partial x}$满秩，$h_j(j=1,\cdots,l)$，在点 $\bar{x}$ 连续可微，这样，对充分小的 $\lambda>0$，必有 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 在 λ 处连续，因此微分方程(3.3.11)存在解 $\alpha(\lambda)$，且当 $\lambda \rightarrow 0^+$时，$\alpha(\lambda) \rightarrow \bar{x}$.

下面证明当 $\lambda>0$ 充分小时，$\alpha(\lambda)$为可行点，并且 $f(\alpha(\lambda))<f(\bar{x})$，从而导致矛盾.

当 $i \in I$ 时，用锁链法则，由(3.3.11)，得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} g_i(\alpha(\lambda))=\nabla g_i(\alpha(\lambda))^{\mathrm{T}} \boldsymbol{P}(\lambda) \boldsymbol{y}. \tag{3.3.12}$$

根据假设，y 在$\dfrac{\partial \boldsymbol{h}(\bar{x})}{\partial x}$的零空间中，有

$$P(0)y=y.$$

这样,由(3.3.9)和(3.3.12)可知

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}g_i(\alpha(0))=\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}y<0,\quad i\in I. \tag{3.3.13}$$

由于

$$g_i(\alpha(0))=g_i(\bar{x})=0,\quad i\in I,$$

因此,当 $\lambda>0$ 充分小时,由(3.3.13)得

$$g_i(\alpha(\lambda))<0. \tag{3.3.14}$$

当 $i\notin I$ 时,$g_i(\bar{x})<0$,且根据假设,函数 $g_i(x)(i\notin I)$在点 $\bar{x}$ 连续,因此对充分小的数 $\lambda>0$,必有

$$g_i(\alpha(\lambda))<0. \tag{3.3.15}$$

再证对充分小的 $\lambda>0$, $h_j(\alpha(\lambda))=0$. 根据中值定理,有

$$\begin{aligned}h_j(\alpha(\lambda))&=h_j(\alpha(0))+\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}h_j(\alpha(\mu))\\&=\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}h_j(\alpha(\mu)).\end{aligned} \tag{3.3.16}$$

其中,μ 是$(0,\lambda)$中某一个数.

用锁链法则,并注意到(3.3.11)及 $P(\mu)y$ 在$\frac{\partial h(\alpha(\mu))}{\partial(x)}$的零空间中,则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}h_j(\alpha(\mu))=\nabla h_j(\alpha(\mu))^{\mathrm{T}}P(\mu)y=0. \tag{3.3.17}$$

把(3.3.17)代入(3.3.16),则

$$h_j(\alpha(\lambda))=0,\quad j=1,\cdots,l. \tag{3.3.18}$$

由(3.3.14),(3.3.15)和(3.3.18)可知,当 $\lambda>0$ 充分小时,$\alpha(\lambda)$是可行点.

用类似于推导(3.3.13)的方法,可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\alpha(0))=\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}y<0.$$

因此对充分小的 $\lambda>0$,有

$$f(\alpha(\lambda))<f(\bar{x}).$$

这个结果与 $\bar{x}$ 是局部最优解相矛盾.因此

$$F_0\cap G_0\cap H_0=\varnothing.$$

下面给出一阶必要条件的代数表达.

定理 3.27 Fritz John 条件 设在问题(3.3.7)中,$\bar{x}$ 为可行点,$I=\{i\mid g_i(\bar{x})=0\}$,$f$ 和$g_i(i\in I)$在点 $\bar{x}$ 可微. $g_i(i\notin I)$在点 $\bar{x}$ 连续,$h_j(j=1,\cdots,l)$在点 $\bar{x}$ 连续可微. 如果 $\bar{x}$ 是局部最优解,则存在不全为零的数 u_0, $u_i(i\in I)$和 $v_j(j=1,\cdots,l)$,使得

$$\begin{cases}u_0\nabla f(\bar{x})+\sum\limits_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum\limits_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0},\\ u_0,u_i\geqslant 0,\quad i\in I.\end{cases}$$

证明 如果$\nabla h_1(\bar{x}),\nabla h_2(\bar{x})\cdots,\nabla h_l(\bar{x})$线性相关,则存在不全为零的数 v_j, $j=1,\cdots,l$,使

$$\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}.$$

这时,可令 $u_0=0, u_i=0, i\in I$,则得出定理的结论.

如果$\nabla h_1(\bar{x}), \nabla h_2(\bar{x}), \cdots, \nabla h_l(\bar{x})$线性无关,则满足定理 3.26 的条件,必有

$$F_0\cap G_0\cap H_0=\varnothing,$$

即

$$\left.\begin{array}{l}\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}<0,\\ \nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}<0, i\in I,\\ \nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}=0, j=1,\cdots,l\end{array}\right\} \tag{3.3.19}$$

无解.

令 $\boldsymbol{A}$ 是以$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}, \nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(i\in I)$为行组成的矩阵, $\boldsymbol{B}$ 是以$\nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}(j=1,\cdots,l)$为行组成的矩阵.这样系统(3.3.19)无解,也就是系统

$$\left.\begin{array}{l}\boldsymbol{Ad}<\boldsymbol{0},\\ \boldsymbol{Bd}=\boldsymbol{0}\end{array}\right\} \tag{3.3.20}$$

无解.

现在定义两个集合:

$$S_1=\left\{\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}_1\\ \boldsymbol{y}_2\end{pmatrix} \mid \boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{Ad}, \boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{Bd}, \boldsymbol{d}\in E^n\right\},$$

$$S_2=\left\{\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}_1\\ \boldsymbol{y}_2\end{pmatrix} \mid \boldsymbol{y}_1<\boldsymbol{0}, \boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{0}\right\}.$$

显然,S_1 和 S_2 均为非空凸集,并且

$$S_1\cap S_2=\varnothing,$$

根据定理 2.5,存在非零向量

$$\boldsymbol{p}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{p}_1\\ \boldsymbol{p}_2\end{pmatrix},$$

使得对每一个 $\boldsymbol{d}\in E^n$ 及每一点

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}_1\\ \boldsymbol{y}_2\end{pmatrix}\in cl S_2,$$

成立

$$\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ad}+\boldsymbol{p}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Bd}\geqslant \boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1+\boldsymbol{p}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2. \tag{3.3.21}$$

令 $\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{0}$.由于 $\boldsymbol{y}_1$ 的每个分量均可为任意负数,因此(3.3.21)的成立蕴涵着

$$\boldsymbol{p}_1\geqslant\boldsymbol{0}. \tag{3.3.22}$$

再令

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}_1\\ \boldsymbol{y}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0}\end{pmatrix}\in cl S_2,$$

则(3.3.21)的成立又蕴涵着

$$\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ad}+\boldsymbol{p}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Bd}\geqslant 0. \tag{3.3.23}$$

由于 $d\in E^n$,可取任何向量,令

$$\boldsymbol{d}=-(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_2),$$

代入(3.3.23),得到

$$-\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_2\|^2\geqslant 0.$$

由此可知

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{0}. \tag{3.3.24}$$

把 p_1 的分量记作 u_0 和 $u_i(i\in I)$，p_2 的分量记作 $v_j(j=1,\cdots,l)$，则(3.3.22)和(3.3.24)即

$$\begin{cases} u_0\nabla f(\bar{x})+\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}, \\ u_0,u_i\geqslant 0,\quad i\in I. \end{cases}$$

由于 p 是非零向量，因此数 $u_0,u_i(i\in I)$ 以及 $v_j(j=1,\cdots,l)$ 不全为零.

在 Fritz John 条件中，不排除目标函数梯度的系数 $u_0=0$ 的情形. 为保证 $u_0\neq 0$，需给约束条件施加某种限制，从而给出一般约束问题的 K-T 必要条件.

定理 3.28　K-T 必要条件　设在问题 3.3.7 中，$\bar{x}$ 为可行点，$I=\{i\mid g_i(\bar{x})=0\}$，$f$ 和 $g_i(i\in I)$ 在点 $\bar{x}$ 可微，$g_i(i\notin I)$ 在点 $\bar{x}$ 连续，$h_j(j=1,\cdots,l)$ 在点 $\bar{x}$ 连续可微，向量集

$$\{\nabla g_i(\bar{x}),\nabla h_j(\bar{x})\mid i\in I,j=1,\cdots,l\}$$

线性无关. 如果 $\bar{x}$ 是局部最优解，则存在数 $u_i(i\in I)$ 和 $v_j(j=1,\cdots,l)$，使得

$$\begin{cases} \nabla f(\bar{x})+\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}, \\ u_i\geqslant 0,\quad i\in I. \end{cases}$$

证明　根据定理 3.27，存在不全为零的数 $u_0,\bar{u}_i(i\in I)$ 和 $\bar{v}_j(j=1,\cdots,l)$，使得

$$u_0\nabla f(\bar{x})+\sum_{i\in I}\bar{u}_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}\bar{v}_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0},$$

$$u_0,\bar{u}_i\geqslant 0,\quad i\in I.$$

由向量组

$$\{\nabla g_i(\bar{x}),\nabla h_j(\bar{x})\mid i\in I,j=1,\cdots,l\}$$

线性无关，必得出 $u_0\neq 0$，否则，上面的向量组将线性相关.

令

$$\begin{cases} u_i=\dfrac{\bar{u}_i}{u_0},\quad i\in I, \\ v_j=\dfrac{\bar{v}_j}{u_0},\quad j=1,\cdots,l, \end{cases}$$

于是得

$$\begin{cases} \nabla f(\bar{x})+\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}, \\ u_i\geqslant 0,\quad i\in I. \end{cases}$$

这里，与只有不等式约束的情形类似，当 $g_i(i\notin I)$ 在点 $\bar{x}$ 也可微时，令其相应的乘子 $u_i=0$，于是可将上述 K-T 条件写成下列等价形式：

$$\begin{cases} \nabla f(\bar{x})+\sum_{i=1}^{m}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}, \\ u_ig_i(\bar{x})=0,\quad i=1,\cdots,m, \\ u_i\geqslant 0,\quad i=1,\cdots,m. \end{cases}$$

其中，$u_ig_i(\bar{x})=0(i=1,\cdots,m)$ 仍称为互补松弛条件.

定义广义的 Lagrange 函数

$$L(x,u,v)=f(x)+\sum_{i=1}^{m}u_ig_i(x)+\sum_{j=1}^{l}v_jh_j(x). \tag{3.3.25}$$

由上面的讨论可知,在定理 3.28 的条件下,若 $\bar{x}$ 为问题(3.3.7)的局部最优解,则存在乘子向量 $\bar{u}_i\geqslant 0$ 和 $\bar{v}$,使得

$$\nabla_x L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})=\mathbf{0}.$$

这样,K-T 乘子 $\bar{u},\bar{v}$ 也称为 Lagrange 乘子.

这时,一般情形的一阶必要条件为

$$\left.\begin{array}{l}\nabla_x L(x,u,v)=\mathbf{0},\\ g_i(x)\leqslant 0,\quad i=1,\cdots,m,\\ h_j(x)=0,\quad j=1,\cdots,l,\\ u_ig_i(x)=0,\quad i=1,\cdots,m,\\ u_i\geqslant 0,\quad i=1,\cdots,m.\end{array}\right\} \tag{3.3.26}$$

例 3.9 试验证 $\bar{x}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$ 是下述问题的 K-T 点:

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=-3x_1^2-x_2^2-2x_3^2,\\ \text{s.t.} & g_1(x)=x_1-x_2\leqslant 0,\\ & g_2(x)=-x_1\leqslant 0,\\ & g_3(x)=-x_2\leqslant 0,\\ & g_4(x)=-x_3\leqslant 0,\\ & h(x)=x_1^2+x_2^2+x_3^2-3=0.\end{array}$$

解 将 $\bar{x}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$ 代入各约束,可知

$$g_2(\bar{x})<0,\ g_3(\bar{x})<0,\ g_4(\bar{x})<0.$$

由互补松弛条件,立即有

$$u_2=u_3=u_4=0.$$

又由于有

$$g_1(\bar{x})=0,h(\bar{x})=0,$$

则 K-T 条件简化为

$$\begin{array}{l}\nabla f(\bar{x})+\bar{u}_1\nabla g_1(\bar{x})+\bar{v}\,\nabla h(\bar{x})=\mathbf{0},\\ \bar{u}_1\geqslant 0.\end{array}$$

经计算,可知

$$\nabla f(\bar{x})=\begin{bmatrix}-6\\-2\\-4\end{bmatrix},\ \nabla g_1(\bar{x})=\begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix},\ \nabla h(\bar{x})=\begin{bmatrix}2\\2\\2\end{bmatrix}.$$

显然,$\nabla g_1(\bar{x})$ 与 $\nabla h(\bar{x})$ 线性无关. K-T 条件等价于:

$$\begin{cases}-6+\bar{u}_1+2\bar{v}=0,\\ -2-\bar{u}_1+2\bar{v}=0,\\ -4+2\bar{v}=0,\\ \bar{u}_1\geqslant 0.\end{cases}$$

解之得 $\bar{v}=2,\bar{u}_1=2>0$. 故 $\bar{x}$ 是 K-T 点.

下面,对于凸规划,给出最优解的充分条件.

定理 3.29 设在问题(3.3.7)中，$f, g_i(i=1,\cdots,m)$是凸函数，$h_j(j=1,\cdots,l)$是线性函数，可行域为 $D, \bar{x}\in D, I=\{i \mid g_i(\bar{x})=0\}$，且在 $\bar{x}$ 处 K-T 必要条件成立，即存在 $u_i\geqslant 0(i\in I)$及 $v_j(j=1,\cdots,l)$，使得

$$\nabla f(\bar{x})+\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x})=\mathbf{0}, \tag{3.3.27}$$

则 $\bar{x}$ 是全局最优解.

证明 由定理的假设易知，可行域 D 是凸集，又目标函数 f 是凸函数，因此问题属于凸规划.

对任意一点 $x\in D$，由于 f 是凸函数，且在 $\bar{x}\in D$ 可微，因此

$$f(x)\geqslant f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}). \tag{3.3.28}$$

由于 $g_i(i\in I)$是凸函数且在 $\bar{x}$ 可微，必有

$$g_i(x)\geqslant g_i(\bar{x})+\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}),\quad i\in I.$$

由于 $x\in D, g_i(x)\leqslant 0$ 及 $g_i(\bar{x})=0$，因此

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})\leqslant 0,\quad i\in I. \tag{3.3.29}$$

由于 $h_j(j=1,\cdots,l)$是线性函数，必有

$$h_j(x)=h_j(\bar{x})+\nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x}). \tag{3.3.30}$$

又因为 x 和 $\bar{x}$ 为可行点，满足

$$h_j(x)=h_j(\bar{x})=0,$$

因此由(3.3.30)得到

$$\nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})=0,\quad j=1,\cdots,l. \tag{3.3.31}$$

由已知条件(3.3.27)，得

$$\nabla f(\bar{x})=-\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(\bar{x})-\sum_{j=1}^{l}v_j\nabla h_j(\bar{x}). \tag{3.3.32}$$

把(3.3.32)代入(3.3.28)，并注意到(3.3.29)，(3.3.31)以及 $u_i\geqslant 0, i\in I$，则得出

$$f(x)\geqslant f(\bar{x}),$$

故 $\bar{x}$ 为全局最优解.

前面给出的一阶最优性条件，都不涉及目标函数和约束函数的二阶导数.实际上，二阶导数反映函数的曲率特性，它们对稳定算法的设计具有重要意义，因此需要研究约束问题的二阶最优性条件.

为给出局部最优解的二阶充分条件，定义集合

$$G=\left\{d\;\middle|\;\begin{array}{l}\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d=0,\ i\in I\ \text{且}\ \bar{u}_i>0\\ \nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d\leqslant 0,\ i\in I\ \text{且}\ \bar{u}_i=0\\ \nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}d=0,\ j=1,\cdots,l\end{array}\right\},$$

其中，d 是非零向量.

定理 3.30 K-T 二阶充分条件 设在问题(3.3.7)中，$f, g_i(i=1,\cdots,m)$和 $h_j(j=1,\cdots,l)$二次连续可微，$\bar{x}$ 为可行点，存在乘子 $\bar{u}=(\bar{u}_1,\cdots,\bar{u}_m)$和 $\bar{v}=(v_1,\cdots,v_l)$使条件(3.2.26)成立，且对于每个非零向量 $d\in G$，都有 $d^{\mathrm{T}}\nabla_x^2L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})d>0$，则 $\bar{x}$ 是严格的局部最优解.

证明 用反证法.假设 $\bar{x}$ 不是严格的局部最优解，则存在收敛于 $\bar{x}$ 的可行序列$\{x^{(k)}\}$，

使

$$f(x^{(k)})\leqslant f(\bar{x}). \tag{3.3.33}$$

令

$$d^{(k)}=\frac{x^{(k)}-\bar{x}}{\| x^{(k)}-\bar{x}\|}, \tag{3.3.34}$$

由于$\{d^{(k)}\}$为有界序列，则必存在收敛子序列$\{d^{(k_j)}\}$，设其极限为$d^{(0)}$. 将$g_i(x)$在点$\bar{x}$展开，再令$x=x^{(k_j)}$，得

$$g_i(x^{(k_j)})=g_i(\bar{x})+\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x^{(k_j)}-\bar{x})+o(\| x^{(k_j)}-\bar{x}\|). \tag{3.3.35}$$

当$i\in I$时，$g_i(\bar{x})=0$，又知$x^{(k_j)}$是可行点，$g_i(x^{(k_j)})\leqslant 0$，因此由(3.3.35)得

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x^{(k_j)}-\bar{x})+o(\| x^{(k_j)}-\bar{x}\|)\leqslant 0,$$

两端除以$\| x^{(k_j)}-\bar{x}\|$，令$k_j\to\infty$，则推得

$$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}\leqslant 0,\quad i\in I. \tag{3.3.36}$$

用类似方法，可得

$$\nabla h_j(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}=0,\quad j=1,\cdots,l, \tag{3.3.37}$$

以及

$$\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}=0. \tag{3.3.38}$$

下面分两种情形讨论：

(1) $d^{(0)}\notin G$. 此时，由(3.3.36)和集合G的定义可知，必存在下标$i\in I$，使得$\bar{u}_i>0$，且$\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}<0$. 这样，利用K-T条件，必然推出下列结果：

$$\begin{aligned}\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}&=-\Big(\sum_{i\in I}\bar{u}_i\nabla g_i(\bar{x})+\sum_{j=1}^{l}\bar{v}_j\nabla h_j(\bar{x})\Big)^{\mathrm{T}}d^{(0)}\\&=-\sum_{i\in I}\bar{u}_i\nabla g_i(\bar{x})^{\mathrm{T}}d^{(0)}>0,\end{aligned}$$

这与(3.3.38)相矛盾.

(2) $d^{(0)}\in G$. 这时，把Lagrange函数$L(x,\bar{u},\bar{v})$在点$\bar{x}$展开，并令$x=x^{(k_j)}$，则有

$$\begin{aligned}L(x^{(k_j)},\bar{u},\bar{v})=&L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})+\nabla_x L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})^{\mathrm{T}}(x^{(k_j)}-\bar{x})+\\&\frac{1}{2}(x^{(k_j)}-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla_x^2 L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})(x^{(k_j)}-\bar{x})+\\&o(\| x^{(k_j)}-\bar{x}\|^2).\end{aligned} \tag{3.3.39}$$

由于$x^{(k_j)}$是可行点，$\bar{u}=(\bar{u}_1,\cdots,\bar{u}_m)\geqslant 0$，根据Lagrange函数的定义，有

$$L(x^{(k_j)},\bar{u},\bar{v})=f(x^{(k_j)})+\sum_{i=1}^{m}\bar{u}_i g_i(x^{(k_j)})+\sum_{j=1}^{l}\bar{v}_j h_j(x^{(k_j)}),$$

因此必有

$$L(x^{(k_j)},\bar{u},\bar{v})\leqslant f(x^{(k_j)}). \tag{3.3.40}$$

又知

$$L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})=f(\bar{x}), \tag{3.3.41}$$

由假设还有

$$\nabla_x L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})=0, \tag{3.3.42}$$

$$f(x^{(k_j)})\leqslant f(\bar{x}). \tag{3.3.43}$$

把(3.3.40)～(3.3.43)代入(3.3.39)，则

$$\frac{1}{2}(x^{(k_j)}-\bar{x})^{\mathrm{T}}\nabla_x^2 L(\bar{x},\bar{u},\bar{v})(x^{(k_j)}-\bar{x})+o(\| x^{(k_j)}-\bar{x}\|^2)\leqslant 0,$$

两端除以 $\| x^{(k_j)} - \bar{x} \|^2$，令 $k_j \to \infty$，得到

$$d^{(0)\mathrm{T}} \nabla_x^2 L(\bar{x}, \bar{u}, \bar{v}) d^{(0)} \leqslant 0.$$

这个结果与 $d^{\mathrm{T}} \nabla_x^2 L(\bar{x}, \bar{u}, \bar{v}) d > 0 (d \in G)$ 的假设相矛盾．所以假设不成立，$\bar{x}$ 是严格的局部最优解．

例 3.10　试证明点 $\bar{x} = (1,1,1)$ 是下述问题的 K-T 点，又是严格局部极小点：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -5x_1^2 - x_2^2 - 2x_3^2, \\ \text{s.t.} \quad & g_1(x) = 6x_1 - 2x_2 - 4 \leqslant 0, \\ & g_2(x) = x_1 + x_2 - 3x_3 \leqslant 0, \\ & h(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 3 = 0. \end{aligned}$$

解　将 $\bar{x} = (1,1,1)$ 代入各约束函数，有

$$g_1(\bar{x}) = 0,\ g_2(\bar{x}) < 0,\ h(\bar{x}) = 0,$$

故

$$\bar{u}_2 = 0.$$

又因为

$$\nabla g_1(\bar{x}) = (6, -2, 0)^{\mathrm{T}}, \nabla h(\bar{x}) = (2,2,2)^{\mathrm{T}},$$
$$\nabla f(\bar{x}) = (-10, -2, -4)^{\mathrm{T}},$$

显然 $\nabla g_1(\bar{x})$ 与 $\nabla h(\bar{x})$ 线性无关．K-T 条件等价于

$$\begin{cases} -10 + 6\bar{u}_1 + 2\bar{v} = 0, \\ -2 - 2\bar{u}_1 + 2\bar{v} = 0, \\ -4 + 2\bar{v} = 0, \\ \bar{u}_1 \geqslant 0. \end{cases}$$

解之得 $\bar{v} = 2, \bar{u}_1 = 1 > 0$．所以 $\bar{x} = (1,1,1)$ 是 K-T 点．

又设非零向量

$$d = (d_1, d_2, d_3)^{\mathrm{T}} \neq 0,$$

令 $d \in G$，有

$$\begin{cases} 6d_1 - 2d_2 = 0, \\ d_1 + d_2 + d_3 = 0. \end{cases}$$

故

$$\begin{cases} d_2 = 3d_1, \\ d_3 \neq 0, \\ d_1 \neq 0, \\ d_2 \neq 0; \end{cases}$$

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} -10 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}, \nabla^2 h(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix},$$

$$\nabla^2 g_1(\bar{x}) = \mathbf{0}（三阶零矩阵）.$$

有

$$\begin{aligned} & d^{\mathrm{T}} [\nabla^2 f(\bar{x}) + \bar{u}_1 \nabla^2 g_i(\bar{x}) + \bar{v} \nabla^2 h(\bar{x})] d \\ &= -6d_1^2 + 2d_2^2 = -6d_1^2 + 2(3d_1)^2 \\ &= 12d_1^2 > 0. \end{aligned}$$

$\bar{x}$ 点满足定理 3.30 的条件．所以 $\bar{x} = (1,1,1)$ 是严格局部极小点．

3.4 迭代下降算法

在解非线性规划时,最常用的计算方法是迭代下降算法.因为在一般情况下,不能用解析方法求得准确解,只能用数值方法逐步求其近似解,即需要用迭代方法求解优化问题的极小点.

迭代法的基本思想是:首先给出 $f(x)$的极小点 $\bar{x}$ 的一个初始估计 $x^{(0)}$(称为初始点),然后,计算一系列的点 $x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(k)}, \cdots$,希望点列$\{x^{(k)}\}$的极限就是 $f(x)$的极小点 $\bar{x}$.在确定了点 $x^{(k)}$之后,有

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}.$$

其中,$d^{(k)}$是一个向量,表示选取的方向,t_k 是正实数,表示步长.当 $d^{(k)}$和 t_k 确定后,由 $x^{(k)}$就可以唯一地确定 $x^{(k+1)}$,这样就可以确定逼近极小点的一个序列$\{x^{(k)}\}$,通常称之为一个极小化序列.选取方向 $d^{(k)}$和步长 t_k 的方法不同,决定了各个不同的算法.

选取方向 $d^{(k)}$和步长 t_k 的原则为:

(1) 极小化序列对应的函数值是逐次减小的,至少是不增的,即

$$f(x^{(0)}) \geqslant f(x^{(1)}) \geqslant \cdots \geqslant f(x^{(k)}) \geqslant \cdots;$$

(2) 极小化序列中的某一点是 $f(x)$的极小点,或者$\{x^{(k)}\}$的极限是 $f(x)$的极小点 $\bar{x}$.

称具有上述性质的算法是收敛的.这个要求是必需的,如果极小化序列不收敛于极小点,那么这个序列就没有什么用处了,但这个要求并不容易做到.

如果算法产生的某个点 $x^{(k)}$正好是所需解决问题的极小点,理所当然地应终止计算.但是这种情形是很难出现的,只好退而求其次.因此,必须规定一些准则,使得计算在经过有限次迭代后在满足所给准则的条件下终止,使得最终产生的点的误差程度已经可以接受.常见的一些终止准则有:

(1) $\| \nabla f(x^{(k)}) \| \leqslant \varepsilon$;

(2) $\| x^{(k+m)} - x^{(k)} \| \leqslant \varepsilon$ 或$\dfrac{\| x^{(k+m)} - x^{(k)} \|}{\| x^{(k)} \|} \leqslant \varepsilon$;

(3) $|f(x^{(k+m)}) - f(x^{(k)})| \leqslant \varepsilon$ 或$\dfrac{|f(x^{(k+m)}) - f(x^{(k)})|}{|f(x^{(k)})|} \leqslant \varepsilon$;

(4) $|f(x^{(k)}) - \alpha| \leqslant \varepsilon$,或$\dfrac{|f(x^{(k)}) - \alpha|}{|\alpha|} \leqslant \varepsilon$.

其中,ε 为预先给定的小正数,称之为计算精度或终止限,α 为预先确定的数,m 为预先给定的正整数.

对于一些特殊算法,还有一些相应的特殊的终止规则.上述终止规则可单独使用,在实际工作中往往联合使用几条准则,所得的近似极小点更理想.

迭代下降算法的步骤如下:

(1) 选择初始点 $x^{(0)}$.

(2) 如果 $x^{(k)}$已求得,且 $x^{(k)}$不是极小点,设法选取一个方向 $d^{(k)}$,使目标函数 $f(x)$沿 $d^{(k)}$是下降的,至少是不增的.$d^{(k)}$称为搜索方向.

(3) 在方向 $d^{(k)}$确定以后,进行一维搜索,即选取适当的步长 t_k,使

$$f(x^{(k)} + t_k d^{(k)}) = \min f(x^{(k)} + t d^{(k)}),$$

由此确定出下一个点 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}$.

(4) 检验所得新点 $x^{(k+1)}$是否为极小点或满足精度要求的近似极小点,检验的方法可以根据以上提到的终止准则,否则继续进行迭代.

给定一个迭代算法,不仅要求它是收敛的,而且希望由这个方法产生的点列$\{x^{(k)}\}$以较快的速度收敛于最优解 $\bar{x}$.收敛的快慢通常由收敛的阶来度量.

定义 3.12 线性收敛(linear convergence) 设由算法产生的点列$\{x^{(k)}\}$收敛于点 $\bar{x}$,若存在正整数 k_0 以及与 k 无关的数$\beta\in(0,1)$,当 $k>k_0$ 时,恒有

$$\| x^{(k+1)}-\bar{x}\| \leqslant \beta \| x^{(k)}-\bar{x}\| ,$$

则此算法具有线性收敛速度.

不失一般性,可以假定上式对于 $k\geqslant 0$ 都成立,于是有

$$\| x^{(k)}-\bar{x}\| \leqslant \beta \| x^{(k-1)}-\bar{x}\| \leqslant \beta^2 \| x^{(k-2)}-\bar{x}\| \leqslant \cdots \leqslant \beta^k \| x^{(0)}-\bar{x}\| .$$

这说明,点 $x^{(k)}$到点 $\bar{x}$ 的距离,当 $k\to+\infty$时,大致以公比为 β 的等比序列减小,因此线性收敛速度相当于相应的等比序列的收敛速度.

定义 3.13 α 阶收敛速度 设由算法产生的点列$\{x^{(k)}\}$收敛于点 $\bar{x}$,若存在正整数 k_0 以及与 k 无关的数$\beta>0,\alpha>1$,当 $k>k_0$ 时,恒有

$$\| x^{(k+1)}-\bar{x}\| \leqslant \beta \| x^{(k)}-\bar{x}\| ^{\alpha},$$

则称此算法具有 α 阶收敛速度.

当 $1<\alpha<2$ 时,称点列$\{x^{(k)}\}$为超线性收敛的(super linear convergence);

当 $\alpha=2$ 时,称点列$\{x^{(k)}\}$为二阶收敛的(quadratic convergence).

一般而言,线性收敛速度是比较慢的,超线性收敛速度相对较快,而二阶收敛速度则相当快.如果一个算法具有超线性收敛速度,从计算速度的角度就认为它是一个比较好的算法.

定义 3.14 有限收敛性 若将某种算法应用于任意一个具有正定 Hessian 矩阵的二次函数时,都能在有限步内达到极小点,则称此算法具有有限收敛性,或二次收敛性.

由于函数在无约束极小点的附近可以近似地表示为具有正定 Hessian 矩阵的二次函数,因而具有有限收敛性的算法的收敛速度通常较快,有的收敛速度为超线性的,有的甚至达到二阶.

3.5 一维搜索

大多数非线性规划的算法可以归结为一个基本格式:从某个初始点 $x^{(0)}$出发,沿某个适当选择的方向(通常是目标函数的下降方向)$d^{(0)}$进行一维搜索,得到目标值较小的点 $x^{(1)}$;再从 $x^{(1)}$出发,沿选择的方向 $d^{(1)}$进行一维搜索,得到目标函数值更小的点 $x^{(2)},\cdots$,如此重复进行,产生一个点列$\{x^{(k)}\}$,在适当的条件下,点列$\{x^{(k)}\}$可趋于极小点 x^*.因此,一维搜索是非线性规划算法的基础.

一维搜索(line search)可归结为单变量函数的极小化问题.设目标函数为 $f(x)$,过点 $x^{(k)}$沿方向 $d^{(k)}$的直线可用点集表示,记作

$$L=\{x\mid x=x^{(k)}+td^{(k)},-\infty<t<+\infty\}.$$

求 $f(x)$在直线 L 上的极小点转化为求一元函数

$$\varphi(t)=f(x^{(k)}+td^{(k)})$$

的极小点.

如果当 t 取 t_k 时, $\varphi(t)$ 极小,那么函数 $f(x)$ 在直线 L 上的极小点为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)},$$

通常称 t_k 为步长.

在进行一维搜索之前,首先要确定初始搜索区间和搜索点.

定义 3.15 搜索区间 设 $\varphi(t)$ 是一元函数, t^* 是 $\varphi(t)$ 的一个(局部)极小点, $[a,b]$ 是包含 t^* 的一个区间,则称区间 $[a,b]$ 是函数 $\varphi(t)$ 的极小点 t^* 的一个搜索区间.

在一维搜索所涉及的函数中,最重要的最常见的是单谷函数.

定义 3.16 单谷函数 设 $\varphi(t)$ 是定义在区间 $[a,b]$ 上的一元函数, t^* 是 $\varphi(t)$ 在 $[a,b]$ 上的全局极小点.如果在 $[a,b]$ 上任取两个点 $t_1<t_2$,当 $t_2\leqslant t^*$ 时,必有 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$,而当 $t_1\geqslant t^*$ 时,必有 $\varphi(t_1)<\varphi(t_2)$,则称 $\varphi(t)$ 是 $[a,b]$ 上的一个单谷函数,或称之为下单峰函数.

容易理解,任意一元函数在其极小点附近都是单谷函数.

定理 3.31 设 φ 是区间 $[a,b]$ 上的单谷函数, $t_1, t_2\in[a,b]$, $t_1<t_2$.如果 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$,则对每一个 $t\in[a,t_1]$,有 $\varphi(t)>\varphi(t_2)$;如果 $\varphi(t_1)\leqslant\varphi(t_2)$,则对每一个 $t\in[t_2,b]$,有 $\varphi(t)\geqslant\varphi(t_1)$.

证明 用反证法证前一种情况.假设 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$ 时,存在 $\hat{t}\in[a,t_1]$,使

$$\varphi(\hat{t})\leqslant\varphi(t_2). \tag{3.5.1}$$

显然 t_1 不是极小点.这时有两种可能性,或者极小点 $t^*\in[a,t_1)$,或者 $t^*\in(t_1,b]$.当 $t^*\in[a,t_1)$ 时,根据单谷函数的定义,有

$$\varphi(t_2)>\varphi(t_1), \tag{3.5.2}$$

这与假设矛盾.当 $t^*\in(t_1,b]$ 时,应有

$$\varphi(\hat{t})>\varphi(t_1). \tag{3.5.3}$$

由于假设 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$,因此(3.5.3)与假设(3.5.1)矛盾.由此可知,当 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$ 时,对每一个 $t\in[a,t_1]$,必有

$$\varphi(t)>\varphi(t_2).$$

同理可证后一种情形.

根据上述定理,可以得到缩短搜索区间的基本原理.

定理 3.32 设 $[a,b]$ 是单谷函数 $\varphi(t)$ 的一个已知搜索区间,在 $[a,b]$ 中任取两点 $t_1<t_2$.

① 如果 $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$,则搜索区间可缩短为 $[t_1,b]$;

② 如果 $\varphi(t_1)\leqslant\varphi(t_2)$,则搜索区间可缩短为 $[a,t_2]$.

根据定理 3.32,只需选择两个试探点,就可将包含极小点的区间缩短.当区间长度小到一定程度时,区间上各点的函数值均接近极小值,因此任意一点都可作为极小点的近似.

当进行一维搜索时,首先要确定初始搜索区间,单谷函数的初始搜索区间一般由进退算法确定.

进退算法的基本步骤如下:

(1) 首先任选一个初始点 t_0,初始步长 $h>0$,计算 $\varphi(t_0)$.

(2) 令 $t_2=t_0+h$,计算 $\varphi(t_2)$.

(3) 若 $\varphi(t_2)\leqslant\varphi(t_0)$,转(4);否则,若 $\varphi(t_2)>\varphi(t_0)$,令 $h=-h, t_2=t_0$,转(4).

(4) 令 $t_1=t_2+h$,计算 $\varphi(t_1)$.

(5) 若 $\varphi(t_1)\leqslant\varphi(t_0)$,则令 $h=2h, t_2=t_0, t_0=t_1$,转(4);否则,若 $\varphi(t_1)>\varphi(t_0)$,转(6).

(6) 令 $a=\min(t_1,t_2), b=\max(t_1,t_2)$,则$[a,b]$即为所求的初始搜索区间,计算停止.

一维搜索的方法很多,大致可分为两类:一为不使用导数的方法,如 Fibonacci 法、0.618 法等;二为使用导数的方法,如对分法、牛顿法、抛物线法、三次插值法等.下面分别介绍各种一维搜索的方法.

3.5.1 Fibonacci 法

Fibonacci 法适用于单谷函数.在计算过程中,第一次迭代需要计算两个试探点,以后每次迭代只需要新算一点,另一点取自上次迭代.Fibonacci 法的特点在于区间长度缩短比率由 Fibonacci 数确定.

定义 3.17 Fibonacci 数列 设有数列$\{F_k\}$,满足条件:

(1) $F_0=F_1=1$,

(2) $F_{k+1}=F_k+F_{k-1}, k=1,2,\cdots$,

则称$\{F_k\}$为 Fibonacci 数列.

根据定义 3.17,Fibonacci 数列的形式见表 3.1.

表 3.1

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	…
F_k	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	…

Fibonacci 法在迭代中计算试探点的公式:

$$\lambda_k=a_k+\frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k),\quad k=1,\cdots,n-1, \tag{3.5.4}$$

$$\mu_k=a_k+\frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k),\quad k=1,\cdots,n-1. \tag{3.5.5}$$

其中,n 是计算函数值的次数(不包含初始区间端点的计算),需要事先给定.

容易验证,利用(3.5.4)和(3.5.5)计算试探点时,第 k 次迭代区间长度的缩短比率恰为F_{n-k}/F_{n-k+1}.

设在第 k 次迭代前,不确定区间为$[a_k,b_k]$.在进行第 k 次迭代时,取试探点

$$\lambda_k,\mu_k\in[a_k,b_k],\ \lambda_k<\mu_k.$$

分别考虑下列两种可能的情形:

(1) $\varphi(\lambda_k)>\varphi(\mu_k)$.令 $a_{k+1}=\lambda_k, b_{k+1}=b_k$,则

$$\begin{aligned}b_{k+1}-a_{k+1}&=b_k-\lambda_k\\&=b_k-\left[a_k+\frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k)\right]\\&=\left(1-\frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}}\right)(b_k-a_k)\\&=\frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k).\end{aligned} \tag{3.5.6}$$

(2) $\varphi(\lambda_k)\leqslant\varphi(\mu_k)$.令 $a_{k+1}=a_k, b_{k+1}=\mu_k$,则

$$b_{k+1}-a_{k+1}=\mu_k-a_k$$
$$=a_k+\frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k)-a_k$$
$$=\frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k-a_k). \tag{3.5.7}$$

(3.5.6)和(3.5.7)表明,不论属于哪种情形,迭代后的区间长度与迭代前的区间长度之比均为 F_{n-k}/F_{n-k+1}.

利用上述比值,可以计算出经过 $n-1$ 次迭代($k=n-1$)所得到的区间长度.

$$b_n-a_n=\frac{F_1}{F_2}(b_{n-1}-a_{n-1})$$
$$=\frac{F_1}{F_2}\cdot\frac{F_2}{F_3}\cdot\dots\cdot\frac{F_{n-1}}{F_n}(b_1-a_1)$$
$$=\frac{1}{F_n}(b_1-a_1). \tag{3.5.8}$$

由此可知,只要给定初始区间长度 b_1-a_1 及精度要求(最终区间长度)ϵ,就可以计算函数值的次数 n(不包括初始区间端点函数值的计算).令

$$b_n-a_n\leqslant\epsilon,$$

即

$$\frac{1}{F_n}(b_1-a_1)\leqslant\epsilon.$$

由此推出

$$F_n\geqslant\frac{b_1-a_1}{\epsilon}. \tag{3.5.9}$$

先由(3.5.9)求出 Fibonacci 数 F_n,再根据 F_n 确定计算函数值的次数 n.

运用 Fibonacci 法时,应注意下列问题:由于第一次迭代计算两个试探点,以后每次计算一个,这样经过 $n-1$ 次迭代就计算了 n 个试探点.但是,在第 $n-1$ 次迭代中并没有选择新的试探点.根据(3.5.4)和(3.5.5),必有

$$\lambda_{n-1}=\mu_{n-1}=\frac{1}{2}(b_{n-1}-a_{n-1}).$$

而 λ_{n-1}和 μ_{n-1}中一个取自第 $n-2$ 次迭代的试探点,为了在第 $n-1$ 次迭代中能够缩短不确定区间,可在第 $n-2$ 次迭代之后.在已确定出 $\lambda_{n-1}=\mu_{n-1}$的 λ_{n-1}的右边或左边取一点,令

$$\lambda_n=\lambda_{n-1},\ \mu_n=\lambda_{n-1}+\delta.$$

其中,辨别常数 $\delta>0$.

Fibonacci 法算法如下:

(1) 给定初始区间$[a_1,b_1]$和最终区间长度 ϵ.求计算函数值的次数 n,使 $F_n\geqslant(b_1-a_1)/\epsilon$,令辨别常数 $\delta>0$,计算试探点 λ_1 和 μ_1,有

$$\lambda_1=a_1+\frac{F_{n-2}}{F_n}(b_1-a_1),$$

$$\mu_1=a_1+\frac{F_{n-1}}{F_n}(b_1-a_1),$$

计算函数值 $\varphi(\lambda_1)$和 $\varphi(\mu_1)$.令 $k=1$.

(2) 若 $\varphi(\lambda_k)>\varphi(\mu_k)$,则转(3);若 $\varphi(\lambda_k)\leqslant\varphi(\mu_k)$,则转(4).

(3) 令 $a_{k+1}=\lambda_k, b_{k+1}=b_k, \lambda_{k+1}=\mu_k$,计算试探点 μ_{k+1},有

$$\mu_{k+1}=a_{k+1}+\frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k}}(b_{k+1}-a_{k+1}).$$

若 $k=n-2$,则转(6);否则,计算函数值 $\varphi(\mu_{k+1})$,转(5).

(4) 令 $a_{k+1}=a_k, b_{k+1}=\mu_k, \mu_{k+1}=\lambda_k$,计算 λ_{k+1},有

$$\lambda_{k+1}=a_{k+1}+\frac{F_{n-k-2}}{F_{n-k}}(b_{k+1}-a_{k+1}).$$

若 $k=n-2$,则转(6);否则,计算 $\varphi(\lambda_{k+1})$,转(5).

(5) 令 $k=k+1$,转(2).

(6) 令 $\lambda_n=\lambda_{n-1}, \mu_n=\lambda_{n-1}+\delta$. 计算 $\varphi(\lambda_n)$和 $\varphi(\mu_n)$. 若 $\varphi(\lambda_n)>\varphi(\mu_n)$,则令 $a_n=\lambda_n, b_n=b_{n-1}$;若 $\varphi(\lambda_n)\leqslant\varphi(\mu_n)$,则令 $a_n=a_{n-1}, b_n=\lambda_n$,

停止计算,极小点含于$[a_n, b_n]$.

例 3.11 用 Fibonacci 法求解:

$$\min \quad \varphi(t)=2t^2-t-1.$$

初始区间$[a_1,b_1]=[-1,1]$,精度 $\varepsilon\leqslant 0.16$.

表 3.2

k	a_k	b_k	λ_k	μ_k	$f(\lambda_k)$	$f(\mu_k)$
1	−1	1	−0.23077	0.23077	−0.66272	−1.12426
2	−0.23077	1	0.23077	0.53846	−1.12426	−0.95858
3	−0.23077	0.53846	0.07692	0.23077	−1.06509	−1.12426
4	0.07692	0.53846	0.23077	0.38461	−1.12426	−1.08876
5	0.07692	0.38461	0.23077	0.23077	−1.12426	−1.12426
6	0.23077	0.38461	0.23077	0.24077	−1.12426	−1.12483

初始区间取$[a_1,b_1]=[-1,1]$,精度 $\varepsilon\leqslant 0.16$,辨别常数 $\delta=0.01$.

由于

$$F_n\geqslant\frac{b_1-a_1}{\varepsilon}=12.5,$$

因此取 $n=6$. 计算结果见表 3.2. 其中

$$\mu_6=\lambda_5+\delta=0.23077+0.01=0.24077.$$

极小点 $\bar{t}\in[0.23077, 0.38461]$.

3.5.2 0.618 法

Fibonacci 法的搜索区间第 k 次缩短的比率 F_{n-1}/F_k 是随 k 的变化而变化的,且需要首先计算各个 F_k,也较麻烦. 现在介绍 0.618 法,其特点是搜索区间每次缩短率都相同,所需插入点的个数较少,算法简单.

0.618 的基本原理是:设$[a,b]$为单谷函数 $\varphi(t)$的初始搜索区间,λ,μ 是对称插入的两个点($\lambda<\mu$). 设搜索区间缩短比恒为 α,则有

$$\frac{\mu-a}{b-a}=\frac{b-\lambda}{b-a}=\alpha,$$

其中,α 为待定常数.

不妨设缩短后的搜索区间为$[a,\mu]$,在$[a,\lambda]$中再插入一个点 ξ,为使下一次的搜索区

间的长度缩短比仍为 α,应有

$$\frac{\lambda-a}{\mu-a}=\frac{\mu-\xi}{\mu-a}=\alpha,$$

$$\frac{\mu-a}{b-a}=\frac{b-\lambda}{b-a}=\frac{\lambda-a}{\mu-a}=\alpha,$$

故
$$\lambda=b-\alpha(b-a),$$
$$\lambda=a+\alpha(\mu-a),$$
$$\mu-a=\alpha(b-a),$$

则
$$\alpha^2+\alpha-1=0,$$

有
$$\alpha=\frac{-1\pm\sqrt{5}}{2}.$$

舍去负根,得

$$\alpha=\frac{\sqrt{5}-1}{2}\approx 0.618,$$

即每次搜索区间缩短比为 $\alpha=0.618$,而插入点 λ,μ 位置为

$$\lambda=b-\alpha(b-a)=a+(1-\alpha)(b-a),$$
$$\mu=a+\alpha(b-a).$$

0.618 算法如下:

(1) 令初始区间 $[a_1,b_1]$ 及精度要求 $\varepsilon>0$,计算试探点 λ_1,μ_1,计算函数值 $\varphi(\lambda_1)$, $\varphi(\mu_1)$,其中

$$\lambda_1=a_1+0.382(b_1-a_1)$$
$$\mu_1=a_1+0.618(b_1-a_1).$$

令 $k=1$.

(2) 若 $b_k-a_k<\varepsilon$,则停止计算.否则,当 $\varphi(\lambda_k)>\varphi(\mu_k)$ 时,转(3);当 $\varphi(\lambda_k)\leqslant\varphi(\mu_k)$ 时,转(4).

(3) 令 $a_{k+1}=\lambda_k, b_{k+1}=b_k, \lambda_{k+1}=\mu_k, \mu_{k+1}=a_{k+1}+0.618(b_{k+1}-a_{k+1})$,计算函数值 $\varphi(\mu_{k+1})$,转(5).

(4) 令 $a_{k+1}=a_k, b_{k+1}=\mu_k, \mu_{k+1}=\lambda_k, \lambda_{k+1}=a_{k+1}+0.382(b_{k+1}-a_{k+1})$,计算函数值 $\varphi(\lambda_{k+1})$,转(5).

(5) 令 $k=k+1$,返回(2).

例 3.12 用 0.618 法解问题

$$\min\quad \varphi(t)=2t^2-t-1.$$

初始区间 $[a_1,b_1]=[-1,1]$,精度 $\varepsilon\leqslant 0.16$.

计算结果见表 3.3.

经过 6 次迭代,得

$$b_7-a_7=0.111<0.16,$$

满足精度要求,极小点为

$$\bar{t}\in[0.168,0.279].$$

实际上,问题的最优 $x^*=0.25$.可取

$$\bar{t}=\frac{1}{2}(0.168+0.279)\approx 0.23$$

作为近似解.

表 3.3

k	a_k	b_k	λ_k	μ_k	$f(\lambda_k)$	$f(\mu_k)$
1	-1	1	-0.236	0.236	-0.653	-1.125
2	-0.236	1	0.236	0.528	-1.125	-0.970
3	-0.236	0.528	0.056	0.236	-1.050	-1.125
4	0.056	0.528	0.236	0.348	-1.125	-1.106
5	0.056	0.348	0.168	0.236	-1.112	-1.125
6	0.168	0.348	0.236	0.279	-1.125	-1.123
7	0.168	0.279				

3.5.3 0.618 法与 Fibonacci 法的关系

0.618 法与 Fibonacci 法都用于单谷函数,通过不断地缩短搜索区间而获得极小点的近似值.0.618 法的区间长度缩短比率是常数,而 Fibonacci 法的区间长度缩短比率由Fibonacci 数确定.当所需插入点的个数 n 充分大的时候, Fibonacci 法的搜索区间缩短比率趋近于 0.618法的缩短比率$(\sqrt{5}-1)/2$.

在应用 Fibonacci 法求极小点时,搜索区间的长度缩短的比率依次是

$$F_{n-1}/F_n,\ F_{n-2}/F_{n-1},\ F_{n-3}/F_{n-2},\ F_{n-4}/F_{n-3},\cdots$$

从这个缩短比数列中取出两个子列

$$\{F_{2k-1}/F_{2k}\},\ \{F_{2k}/F_{2k+1}\}.$$

首先可以证明, $\{F_{2k-1}/F_{2k}\}$单调升, $\{F_{2k}/F_{2k+1}\}$单调降.

证明 以$\{F_{2k-1}/F_{2k}\}$为例,显然,只需证明对任意 k, $F_{2k-1}/F_{2k}-F_{2k+1}/F_{2k+2}$是负数即可.当 $k=1$ 时, $F_1/F_2-F_3/F_4=1/2-3/5<0$,结论成立.

设 $k=m-1$ 时结论成立,有

$$\frac{F_{2(m-1)-1}}{F_{2(m-1)}}-\frac{F_{2m-1}}{F_{2m}}<0,$$

即

$$F_{2m-3}F_{2m}-F_{2m-1}F_{2m-2}<0. \tag{3.5.10}$$

当 $k=m$ 时,有

$$\frac{F_{2m-1}}{F_{2m}}-\frac{F_{2(m+1)-1}}{F_{2(m+1)}}=\frac{F_{2m-1}F_{2m+2}-F_{2m}F_{2m+1}}{F_{2m}F_{2m+2}}. \tag{3.5.11}$$

其中,

$$\begin{aligned}
&F_{2m-1}F_{2m+2}-F_{2m}F_{2m+1}\\
&=F_{2m-1}(F_{2m+1}+F_{2m})-F_{2m}(F_{2m}+F_{2m-1})\\
&=F_{2m-1}F_{2m+1}-F_{2m}F_{2m}\\
&=(F_{2m-2}+F_{2m-3})(F_{2m}+F_{2m-1})-F_{2m}(F_{2m-1}+F_{2m-2})\\
&=F_{2m-3}F_{2m}+(F_{2m-2}+F_{2m-3})F_{2m-1}-F_{2m}F_{2m-1}\\
&=F_{2m-3}F_{2m}+F_{2m-1}F_{2m-1}-(F_{2m-1}+F_{2m-2})F_{2m-1}\\
&=F_{2m-3}F_{2m}-F_{2m-1}F_{2m-2}<0.
\end{aligned}$$

代入(3.5.11),有

$$\frac{F_{2m-1}}{F_{2m}}-\frac{F_{2(m+1)-1}}{F_{2(m+1)}}<0.$$

其次,可证明

$$\lim_{k\to\infty}(F_{2k-1}/F_{2k})=\lim_{k\to\infty}(F_{2k}/F_{2k+1})=\frac{\sqrt{5}-1}{2}.$$

证明 显然,数列$\{F_{2k-1}/F_{2k}\}$,$\{F_{2k}/F_{2k+1}\}$均有界,且前已证明两者单调,故两者极限存在,不妨设

$$\lim_{k\to\infty}F_{2k-1}/F_{2k}=\alpha,$$

$$\lim_{k\to\infty}F_{2k}/F_{2k+1}=\beta,$$

$$\lim_{k\to\infty}F_{2k-1}/F_{2k}=\lim_{k\to\infty}(F_{2k-1}/(F_{2k}+F_{2k-2}))$$

$$=\lim_{k\to\infty}(1+F_{2k-2}/F_{2k-1})^{-1}=(1+\beta)^{-1},$$

故

$$\alpha=(1+\beta)^{-1} \tag{3.5.12}$$

同理

$$\beta=(1+\alpha)^{-1}. \tag{3.5.13}$$

将(3.5.13)代入(3.5.12),有

$$\alpha=\beta=(-1\pm\sqrt{5})/2,$$

舍去负根,得

$$\alpha=\beta=(\sqrt{5}-1)/2.$$

从对目标函数性质的要求看,Fibonacci 法以及 0.618 法对函数的连续性、可微性都没有要求,甚至写不出函数解析表达式也没有关系,只要对于所选定的插入点能找出对应的函数值就可以了.因此,这两种算法具有最广泛的适应性.尤其是对一些生产实践中的问题,虽然不存在确切的函数解析表达式,但是可以通过测量等手段获得指定观测点的有关数据,因而,仍然可以采用 Fibonacci 法或 0.618 法找到极小点.

3.5.4 对分法

无论是 Fibonacci 法,还是 0.618 法,都是利用插入点目标函数值进行比较大小而缩短搜索区间,两者都没有使用导数信息,然而利用的信息越多,就越有可能找出更有效的方法.下面介绍的对分法就是一种利用目标函数的导数进行一维搜索的有效方法.

对分法基本原理:设 $\varphi(t)$为具有一阶连续导数的单谷函数,初始搜索区间为$[a,b]$,t^*是极小点.显然,对$[a,b]$上某点 c,由于 $\varphi'(t)$存在且连续,所以有:当 $\varphi'(c)=0$ 时,则 c 是极小点 t^*;当 $\varphi'(c)<0$ 时,则 $t^*\in[c,b]$;当 $\varphi'(c)>0$ 时,则 $t^*\in[a,c]$.如图 3.8.

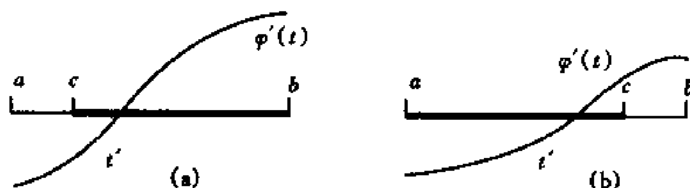


图 3.8

下面讨论插入点 c 的位置.显然,在插入 c 点后,所得的新搜索区间的长度最坏情形为

$$\max\{c-a \quad b-c\}. \tag{3.5.14}$$

其最小值为

$$\min \max\{c-a \quad b-c\}. \tag{3.5.15}$$

不失一般性,可设

$$c-a \leqslant b-c, \tag{3.5.16}$$

则当(3.5.16)的等号成立时,可望达到(3.5.15)的最小值.

所以应有

$$c-a=b-c,$$
$$c=0.5(a+b).$$

对分法的算法步骤:设单谷函数 $\varphi(t)$ 存在导函数 $\varphi'(t)$,极小点的初始搜索区间是 $[a_0, b_0]$,要求极小点的近似值 $\bar{t}$ 与精确极小点 t^* 的最大绝对误差 $|\bar{t}-t^*|$ 不超过 ε.

(1) 令 $a=a_0, b=b_0$.

(2) 令 $c=0.5(a+b)$,计算 $\varphi'(c)$.

(3) 若 $\varphi'(c)<0$,令 $a=c$,转(4);若 $\varphi'(c)>0$,令 $b=c$,转(4);若 $\varphi'(c)=0$,令 $\bar{t}=c$,转(5).

(4) 若 $|b-a|\leqslant 2\varepsilon$,令 $\bar{t}=0.5(a+b)$,转(5);否则,转(2).

(5) 输出 $\bar{t}$,计算停止.

例 3.13 用对分法求解

$$\begin{aligned} \min \quad & \varphi(t)=t^2-6t+10, \\ \text{s.t.} \quad & 1\leqslant t\leqslant 10. \end{aligned}$$

要求最大绝对误差 $\varepsilon\leqslant 0.3$.

计算结果见 3.4.

表 3.4

k	a_k	b_k	c_k	$\varphi'(c_k)$	$\lvert b-a\rvert$
1	1	10	5.5	5	
2	1	5.5	3.25	0.5	4.5
3	1	3.25	2.125	−1.75	2.25
4	2.125	3.25	2.6875	−0.625	1.125
5	2.6875	3.25	2.96875		0.5625

极小点 $\bar{t}=2.96875$. 而原问题的精确极小点为 $t^*=3$,误差仅为

$$|\bar{t}-t^*|=|2.96875-3|=0.03125<\varepsilon=0.3.$$

3.5.5 牛顿法

牛顿法(Newton method)的基本思想是,用 $\varphi(t)$ 在已知点 t_k 处的二阶 Taylor 展开式 $g(t)$ 近似代替 $\varphi(t)$,即取 $\varphi(t)\approx g(t)$,其中

$$g(t)=\varphi(t_k)+\varphi'(t_k)(t-t_k)+\frac{1}{2}\varphi''(t_k)(t-t_k)^2.$$

用 $g(t)$ 的极小点作为 $\varphi(t)$ 的极小点. 由于

$$g'(t)=\varphi'(t_k)+\varphi''(t_k)(t-t_k),$$

令 $g'(t)=0$,得到 $g(t)$ 的驻点,记作 t_{k+1},则

$$t_{k+1}=t_k-\frac{\varphi'(t_k)}{\varphi''(t_k)}. \tag{3.5.17}$$

如果 t_k 是 $\varphi(t)$ 的极小点的一个估计，那么利用(3.5.17)能够得到极小点的一个进一步的估计. 如此继续迭代下去，能够得到一个序列 $\{t_k\}$. 可以证明，在一定条件下，这个序列收敛于最优解，而且是二阶收敛.

定理 3.33 设 $\varphi(t)$ 存在连续三阶导数，$\bar{t}$ 满足

$$\varphi'(\bar{t})=0,\ \varphi''(\bar{t})\neq 0,$$

初始点 t_1 充分接近 $\bar{t}$，则牛顿法产生的序列 $\{t_k\}$ 至少以二阶收敛速率收敛于 $\bar{t}$.

证明 牛顿法可定义为算法映射

$$A(t)=t-\frac{\varphi'(t)}{\varphi''(t)}. \tag{3.5.18}$$

设集合 $\Omega=\{\bar{t}\}$. 定义函数

$$\alpha(t)=|t-\bar{t}|.$$

下面证明 α 是关于解集合 Ω 和算法 A 的下降函数.

设 $t_k\neq\bar{t}$，$t_{k+1}\in A(t_k)$. 注意到已知条件

$$\begin{aligned}
\varphi'(\bar{t}) &= 0,\\
\alpha(t_{k+1}) &= |t_{k+1}-\bar{t}|\\
&= \left|t_k-\frac{\varphi'(t_k)}{\varphi''(t_k)}-\bar{t}\right|\\
&= \frac{1}{|\varphi''(t_k)|}|t_k\varphi''(t_k)-\varphi'(t_k)-\bar{t}\varphi''(t_k)|\\
&= \frac{1}{|\varphi''(t_k)|}|\varphi'(\bar{t})-[\varphi'(t_k)+(\bar{t}-t_k)\varphi''(t_k)]|\\
&= \frac{1}{|\varphi''(t_k)|}\cdot\frac{1}{2}(\bar{t}-t_k)^2|\varphi'''(\xi)|,\quad \xi\in(\bar{t},t_k).
\end{aligned} \tag{3.5.19}$$

由于 $\varphi''(t)$ 和 $\varphi'''(t)$ 连续，$\varphi''(\bar{t})\neq 0$，因此当 t_k 接近 $\bar{t}$ 时，必存在 $k_1,k_2>0$，使得在包含 t_k 和 $\bar{t}$ 的闭区间上的每一点 t 处，成立

$$|\varphi''(t)|\geqslant k_1,\ |\varphi'''(t)|\leqslant k_2. \tag{3.5.20}$$

将(3.5.20)代入(3.5.19)，则有

$$|t_{k+1}-\bar{t}|\leqslant\frac{k_2}{2k_1}(t_k-\bar{t})^2. \tag{3.5.21}$$

取初始点 t_1 充分接近 $\bar{t}$，使得

$$\frac{k_2}{2k_1}|t_1-\bar{t}|<1,$$

由此推得

$$\{t_k\}\subset T=\{t\mid |t-\bar{t}|\leqslant|t_1-\bar{t}|\},$$

且有

$$|t_{k+1}-\bar{t}|<|t_k-\bar{t}|. \tag{3.5.22}$$

由此可知，α 是关于解集合 Ω 和算法 A 的下降函数，且 T 为紧集，$A(t)$ 在 T 上连续. 所以 $\{t_k\}$ 收敛于 $\bar{t}$. 由(3.5.21)又知，$\{t_k\}$ 的收敛阶为 2.

牛顿法算法步骤如下：

(1) 给定初始点 t_0, 允许误差 $\varepsilon>0$, 令 $k=0$;

(2) 若 $|\varphi'(t_k)|<\varepsilon$, 则停止迭代, 得到点 t_k; 否则转(3).

(3) 计算点 t_{k+1}:

$$t_{k+1}=t_k-\frac{\varphi'(t_k)}{\varphi''(t_k)},$$

令 $k=k+1$, 转(2).

运用牛顿法时, 初始点的选择十分重要. 如果初始点靠近极小点, 则可能很快收敛; 如果初始点远离极小点, 迭代产生的点列可能不收敛于极小点.

3.5.6 抛物线法

抛物线法的基本原理是, 在极小点附近, 用二次三项式 $g(t)$ 近似地代替 $\varphi(t)$, 并以 $g(t)$ 的极小点近似地代替 $\varphi(t)$ 的极小点. 它与牛顿法的不同之处在于: 牛顿法是用 t_k 处的二阶 Taylor 展开式 $g(t)$ 来逼近 $\varphi(t)$, 即利用 t_k 点的函数值 $\varphi(t_k)$ 及其一阶、二阶导数值 $\varphi'(t_k)$, $\varphi''(t_k)$ 来构造二次函数 $g(t)$, 抛物线法则是利用 $\varphi(t)$ 在三点 $t_1<t_2<t_3$ 处的函数值来构造一个二次函数 $g(t)=a+bt+ct^2$, 并使它满足

$$\begin{cases}g(t_1)=\varphi(t_1),\\ g(t_2)=\varphi(t_2),\\ g(t_3)=\varphi(t_3),\end{cases}$$

由于

$$g'(t)=b+2ct.$$

令 $g'(t)=0$, 得

$$\bar{t}=-\frac{b}{2c}. \tag{3.5.23}$$

(3.5.23)就是计算 $\varphi(t)$ 的近似极小点的公式, 为了求出近似极小点 $\bar{t}$, 只需算出 b, c 即可.

令 $\varphi(t_1)=\varphi_1$, $\varphi(t_2)=\varphi_2$, $\varphi(t_3)=\varphi_3$, 得

$$\begin{cases}a+bt_1+ct_1^2=\varphi_1,\\ a+bt_2+ct_2^2=\varphi_2,\\ a+bt_3+ct_3^2=\varphi_3.\end{cases}$$

消去 a, 得

$$\begin{cases}b(t_2-t_1)+c(t_2^2-t_1^2)=\varphi_2-\varphi_1,\\ b(t_3-t_2)+c(t_3^2-t_2^2)=\varphi_3-\varphi_2.\end{cases}$$

消去 b, 得

$$c=\frac{\dfrac{\varphi_3-\varphi_2}{t_3-t_2}-\dfrac{\varphi_2-\varphi_1}{t_2-t_1}}{t_3-t_1}.$$

令

$$\begin{cases}\dfrac{\varphi_2-\varphi_1}{t_2-t_1}=u,\\ \dfrac{\varphi_3-\varphi_2}{t_3-t_2}=v,\end{cases}$$

则得
$$c=\frac{v-u}{t_3-t_1},$$
故
$$b=u-c(t_1+t_2).$$
代入(3.5.23)即可求得 $\varphi(t)$ 的近似极小点 $\bar{t}$.

这里通常假设 $\varphi(t)\in C^1$, $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$, $\varphi(t_2)<\varphi(t_3)$, 可以证明 $c>0$, 即 $g''(\bar{t})>0$, 因而求得的 $\bar{t}$ 确是 $g(t)$ 的极小点, 也就是 $\varphi(t)$ 的近似极小点. 因此, 迭代前必须先求出满足上述条件的三个初始点. 寻找初始点的方法, 可用前面提供的进退法.

迭代的结束准则可以采用以下几种:

(1) 若 $|\varphi(\bar{t})-\varphi(t_2)|<\varepsilon$, 则迭代结束, 取 $t^*\approx\bar{t}$; 否则, 在 $\bar{t}, t_1, t_2, t_3$ 中, 选取目标函数值最小的点为新的 t_2, 并使新的 t_1, t_3 是新的 t_2 左右两边的点, 再继续进行迭代, 直到获得近似最优解为止.

(2) 若 $|\bar{t}-t_2|<\varepsilon$, 则迭代结束, 取 $t^*\approx\bar{t}$; 否则继续进行迭代.

(3) 若 $|\varphi(\bar{t})-g(\bar{t})|<\varepsilon$, 则迭代结束, 取 $t^*\approx\bar{t}$; 否则继续进行迭代.

抛物线法算法如下:

(1) 给定初始点 t_1, t_2, t_3, 要求满足 $t_1<t_2<t_3$, $\varphi(t_1)>\varphi(t_2)$, $\varphi(t_2)<\varphi(t_3)$. 给定允许误差 $\varepsilon>0$.

(2) 计算 u, v, b, c, 根据(3.5.23)得到 $\bar{t}$.

(3) 计算 $\varphi(\bar{t})$, $\varphi(t_2)$, 若 $|\varphi(\bar{t})-\varphi(t_2)|<\varepsilon$, 则停止计算, 得到点 $\bar{t}$; 否则, 转(4).

(4) 计算 $\varphi(\bar{t})$, $\varphi(t_1)$, $\varphi(t_2)$, $\varphi(t_3)$. 令 $\varphi(t_2)=\min\{\varphi(\bar{t}),\varphi(t_1),\varphi(t_2),\varphi(t_3)\}$, 并从得到的 t_2 点的两边选取两点, 左边的作为 t_1, 右边的作为 t_3 点. 转(2).

应当指出, 上面介绍的抛物线法并不能保证算法一定收敛, 在迭代过程中可能出现上一次迭代点 t_k 与下一次迭代点 t_{k+1} 充分接近, 而 t_{k+1} 并不是 $\varphi(t)$ 的近似极小点的退化情况. 但是, 若已知由抛物线法产生的点列 $\{t_k\}$ 收敛于 $\varphi(t)$ 的极小点 t^*, 则可以证明: 在一定条件下, 抛物线法是超线性收敛的, 其收敛阶约为 1.3.

3.5.7 三次插值法

三次插值法是用 t_1, t_2 处的函数值 $\varphi(t_1)$, $\varphi(t_2)$ 和导数值 $\varphi'(t_1)$, $\varphi'(t_2)$ 来构造三次插值多项式 $g(t)$, 并以 $g(t)$ 的极小点作为 $\varphi(t)$ 的近似极小点.

首先选取两个初始点 t_1, t_2, 且 $t_1<t_2$, 使得 $\varphi'(t_1)<0$, $\varphi'(t_2)>0$. 这样, 在区间 (t_1, t_2) 内才存在极小点. 然后利用在这两点的函数值和导数构造一个三次多项式 $g(x)$, 使 $\varphi(t_1)=g(t_1)$, $\varphi(t_2)=g(t_2)$, $\varphi'(t_1)=g'(t_1)$, $\varphi'(t_2)=g'(t_2)$.

用这样的 $g(x)$ 逼近目标函数 $\varphi(x)$, 进而用 $g(x)$ 的极小点估计 $\varphi(x)$ 的极小点. 具体做法如下.

令
$$g(x)=a(t-t_1)^3+b(t-t_1)^2+c(t-t_1)+d, \tag{3.5.24}$$
有
$$\varphi(t_1)=g(t_1), \tag{3.5.25}$$
$$\varphi'(t_1)=g'(t_1), \tag{3.5.26}$$
$$\varphi(t_2)=g(t_2), \tag{3.5.27}$$
$$\varphi'(t_2)=g'(t_2). \tag{3.5.28}$$
把(3.5.25)~(3.5.28)依次代入(3.5.24), 得

$$
\left.\begin{aligned}
&d=\varphi(t_1),\\
&c=\varphi'(t_1),\\
&a(t_2-t_1)^3+b(t_2-t_1)^2+c(t_2-t_1)+d=\varphi(t_2),\\
&3a(t_2-t_1)^2+2b(t_2-t_1)+c=\varphi'(t_2).
\end{aligned}\right\} \tag{3.5.29}
$$

解方程组(3.5.29),可以求出系数 a,b,c,d,从而能够完全确定多项式(3.5.24).

若求多项式 $g(t)$的极小点,必须求出满足

$$g'(t)=0 \text{ 及 } g''(t)>0$$

的点.可以知道

$$
\begin{cases}
g'(t)=3a(t-t_1)^2+2b(t-t_1)+c, & (3.5.30)\\
g''(t)=6a(t-t_1)+2b. & (3.5.31)
\end{cases}
$$

因此令 $g'(t)=0$,即

$$3a(t-t_1)^2+2b(t-t_1)+c=0. \tag{3.5.32}$$

解方程(3.5.32),有两种情形:

(1) 当 $a=0$ 时,得

$$\bar{t}-t_1=-\frac{c}{2b}; \tag{3.5.33}$$

(2) 当 $a\neq 0$ 时,得

$$\bar{t}-t_1=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-3ac}}{3a}. \tag{3.5.34}$$

以上得到两种情形下 $g(t)$的驻点 $\bar{t}$.

在第一种情况下,$g''(t)=2b>0$.这是因为,由假设及(3.5.29)可知

$$c=\varphi'(t_1)<0,\ \varphi'(t_2)>0,\ t_2>t_1.$$

因此由(3.5.29)第 4 个方程得 $b>0$.故 $\bar{t}$ 是$g(t)$的极小点.

在第二种情况下,把方程的两个根(3.5.34)代入(3.5.31),有

$$
\begin{aligned}
g''(\bar{t})&=6a(\bar{t}-t_1)+2b\\
&=6a\cdot\frac{-b\pm\sqrt{b^2-3ac}}{3a}+2b\\
&=\pm 2\sqrt{b^2-3ac}.
\end{aligned}
$$

为求满足二阶充分条件的点,即使 $g''(\bar{t})>0$ 的点,显然,在(3.5.34)中应取

$$\bar{t}-t_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-3ac}}{3a}=\frac{-c}{b+\sqrt{b^2-3ac}}. \tag{3.5.35}$$

当 $a=0$ 时,$b>0$,因此由(3.5.35)得

$$\bar{t}-t_1=-\frac{c}{2b}.$$

这个结果恰是(3.5.33).这表明(3.5.35)是在 $a=0$ 和 $a\neq 0$ 两种情形下极小点的统一表达式.

这样,可以解方程组(3.5.29),求出系数 a,b,c,再代入(3.5.35),从而得到 $g(t)$的极小点 $\bar{t}$.

下面求系数 a,b,c.由(3.5.29)的第三个方程,得

$$a(t_2-t_1)^2+b(t_2-t_1)=\frac{\varphi(t_2)-d}{t_2-t_1}-c.$$

令
$$u=\frac{\varphi(t_2)-d}{t_2-t_1}-c=\frac{\varphi(t_2)-\varphi(t_1)}{t_2-t_1}-\varphi'(t_1),$$

得
$$a(t_2-t_1)^2+b(t_2-t_1)=u.$$

由(3.5.29)的第四个方程,得
$$3a(t_2-t_1)^2+2b(t_2-t_1)=\varphi'(t_2)-c.$$

令
$$v=\varphi'(t_2)-c=\varphi'(t_2)-\varphi'(t_1),$$

得
$$3a(t_2-t_1)^2+2b(t_2-t_1)=v,$$

消去 a,得
$$b=\frac{3u-v}{t_2-t_1},\quad a=\frac{v-2u}{(t_2-t_1)^2}.$$

将 a,b,c 代入(3.5.35),即可求得 $g(t)$的极小点 $\bar{t}$.

若$|\varphi'(\bar{t})|<\varepsilon$,则取 $t^*\approx\bar{t}$,否则继续进行迭代,当 $\varphi'(\bar{t})<0$ 时,用 $\bar{t}$ 代替t_1,否则用 $\bar{t}$ 代替t_2,直到得到所要求的近似极小点为止.

三次插值法算法如下:

(1) 给定初始点 t_1,t_2,计算 $\varphi(t_1),\varphi(t_2),\varphi'(t_1),\varphi'(t_2)$,要求满足 $t_1<t_2,\varphi'(t_1)<0,\varphi'(t_2)>0$,给定允许误差 $\varepsilon>0$.

(2) 按照(3.5.35)计算 $u,v,a,b,\bar{t}$.

(3) 计算 $\varphi'(\bar{t})$.若 $\varphi'(\bar{t})=0$,则停止计算,得到点 $\bar{t}$.否则,转(4).

(4) 若 $\varphi'(\bar{t})<0$,则令 $t_1=\bar{t},\varphi(t_1)=\varphi(\bar{t}),\varphi'(t_1)=\varphi'(\bar{t})$,转(2);若 $\varphi'(\bar{t})>0$,则令 $t_2=\bar{t},\varphi(t_2)=\varphi(\bar{t}),\varphi'(t_2)=\varphi'(\bar{t})$,转(2).

为说明算法的使用,举一个简例.

例 3.14 用三次插值法求解问题:
$$\begin{aligned}\min\quad &\varphi(t)=t^3-3t+1,\\ \text{s.t.}\quad &0\leqslant t\leqslant 2.\end{aligned}$$

取初始点 $t_1=0,t_2=2$,计算如表 3.5 所示.经一次迭代达到极小点 $\bar{t}=1$.

表 3.5

t_1	t_2	$\varphi(t_1)$	$\varphi(t_2)$	$\varphi'(t_1)$	$\varphi'(t_2)$	
0	2	1	3	−3	9	
u	v	a	b	$\bar{t}$	$\varphi(\bar{t})$	$\varphi'(\bar{t})$
4	12	1	0	1	−1	0

三次插值法的收敛阶为 2,一般认为这种方法优于抛物线法.

3.6 最速下降法

无约束非线性规划问题的解法很多,包括最速下降法、牛顿法、共轭梯度法、变尺度法、直接搜索法等.这些方法在以后将经常用到,也是学习约束优化方法的基础.

一般来说,无约束问题的求解是通过一系列一维搜索来实现的.因此,如何选择搜索方向是解无约束问题的核心问题,选择不同的搜索方向,形成了不同的最优化方法.下面,分别

介绍各种算法.

最速下降法(steepest descent method),也叫梯度法(gradient method),是1847年法国著名数学家Cauchy最早提出的,后来,Cauchy等人又作了进一步的研究.最速下降法是一种最基本的算法,并且对其他算法的研究也很有启发作用,后来提出的不少算法都是人们试图改进这种算法的结果.下面先来讨论怎样选择最速下降方向.

考虑无约束问题

$$\min \quad f(x), x \in E^n. \tag{3.6.1}$$

其中,函数 $f(x)$ 具有一阶连续偏导数.

设 $\boldsymbol{d}$ 为任意给定的一个单位向量,t 为正实数,$f(x)$ 在 $x^{(0)}$ 处的Taylor展开式为

$$f(x^{(0)} + t\boldsymbol{d}) = f(x^{(0)}) + t(\nabla f(x^{(0)}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d} + o(t).$$

其中,$o(t)$ 是 t 的高阶无穷小,而

$$\begin{aligned}\nabla f(x^{(0)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d} &= \|\nabla f(x^{(0)})\| \cdot \|\boldsymbol{d}\| \cos(\nabla f(x^{(0)}), \boldsymbol{d}) \\ &= \|\nabla f(x^{(0)})\| \cos(\nabla f(x^{(0)}), \boldsymbol{d}),\end{aligned}$$

所以,当 $(\nabla f(x^{(0)}), \boldsymbol{d}) = \pi$ 时,即

$$\boldsymbol{d} = -\frac{\nabla f(x^{(0)})}{\|\nabla f(x^{(0)})\|}$$

时,$f(x)$ 在 $x^{(0)}$ 点附近下降最快.因此,称 $\boldsymbol{d}$ 为 $f(x)$ 在 $x^{(0)}$ 点的最速下降方向.

最速下降算法步骤如下:

(1) 给出初始点 $x^{(0)} \in E^n$,精度 $\varepsilon > 0$,令 $k = 0$;

(2) 计算 $\nabla f(x^{(k)})$;

(3) 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| < \varepsilon$,则迭代结束,取 $\bar{x} = x^{(k)}$,否则转(4);

(4) $\|\nabla f(x^{(k)})\| \geqslant \varepsilon$,用一维搜索求 $\varphi(t) = f(x^{(k)} - t\nabla f(x^{(k)}))$ 的一个极小点 t_k,使 $f(x^{(k)} - t_k\nabla f(x^{(k)})) < f(x^{(k)})$.

(5) 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} - t_k\nabla f(x^{(k)})$,$k = k+1$,转(2).

不加证明地给出收敛性定理:设 $f: E^n \to E^1$ 连续可微,$x^{(0)} \in E^n$,如果水平集 $L = \{x \mid f(x) \leqslant f(x^{(0)})\}$ 有界,则最速下降法或者在有限步迭代后停止,或者得到点列 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是 $f(x)$ 的稳定点.若进一步假设 $f(x)$ 为凸函数,则应用最速下降法,或者在有限步迭代后达到 $f(x)$ 的最小点,或者得到点列 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是 $f(x)$ 的最小点.

最速下降法方法简单,每迭代一次的工作量较小,所需要的存贮量也小,即使从一个不好的初始点出发,也能保证算法的收敛性.

最速下降法的缺点是在极小点附近收敛得很慢.由于梯度是函数的局部性质,从局部看,在一点附近下降得快,但从总体上来看可能走许多弯路.事实上,若 $x^{(k+1)}$ 是沿方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$ 用一维搜索求得的,即 t_k 为 $\varphi(t) = f(x^{(k)} + t\boldsymbol{d}^{(k)})$ 的极小点,那么 $\varphi(t)$ 在 t_k 的一阶导数为零,即

$$\nabla f(x^{(k+1)})^{\mathrm{T}}\nabla f(x^{(k)}) = 0.$$

这说明相邻的两个迭代方向正交,迭代路线呈锯齿状,尤其是在极小点附近,锯齿现象尤为严重,从而影响了迭代速度.

此外,最速下降法的收敛速度与变量的尺度关系很大,且关于小的扰动是不稳定的,舍入误差的存在或一维搜索时步长确定的不准确,都可能破坏方法的收敛性.

但是,最速下降法的适应面很宽,它仅仅要求函数可微.离极小点较远的地方,其效果较好,而离极小点较近的地方,其效果较差,函数值改进很慢.因此,常常在计算开始时使用最

速下降法，而在迭代一段时间后，改用其他算法.

3.7 牛顿法

以前讲过求解一维问题的牛顿法，可以将它推广到多维的情况.这个方法也是求解无约束极值问题的最古老的方法之一，已发展成为一类算法.

3.7.1 牛顿法

与一维问题类似，在局部用一个二次函数 $g(x)$ 近似地代替目标函数 $f(x)$，然后用 $g(x)$ 的极小点作为 $f(x)$ 的近似极小点.

设 $x^{(k)}$ 是 $f(x)$ 的一个近似极小点，将 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 点进行 Taylor 展开，并略去高于二次的项，则得

$$f(x)\approx g(x)=f(x^{(k)})+(\nabla f(x^{(k)}))^{\mathrm{T}}(x-x^{(k)})+\frac{1}{2}(x-x^{(k)})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^{(k)})(x-x^{(k)}),$$

容易求得 $\nabla g(x)=\nabla f(x^{(k)})+\nabla^2 f(x^{(k)})(x-x^{(k)})$.

当 Hessian 矩阵 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 可逆时，令 $\nabla g(x)=\mathbf{0}$，得 $g(x)$ 的极小点为

$$\tilde{x}=x^{(k)}-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)}),$$

取 $\tilde{x}$ 作为 $f(x)$ 的近似极小点，就得到牛顿法的迭代公式

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)}). \tag{3.7.1}$$

其中，$[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}$ 是 Hessian 矩阵 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 的逆矩阵.

记 $d^{(k)}=-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)})$，通常称 $d^{(k)}=-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)})$ 为牛顿方向(Newton direction).

(3.7.1)表明，从当前点 $x^{(k)}$ 出发，沿牛顿方向搜索，取步长为 1，即可达到 $x^{(k+1)}$.这样，知道 $x^{(k)}$ 后，算出在这一点处目标函数的梯度和 Hessian 矩阵的逆代入(3.7.1)，便得到后继点 $x^{(k+1)}$.依此类推，产生序列 $\{x^{(k)}\}$.在适当的条件下，这个序列收敛.但是，如果 $g(x)$ 与 $f(x)$ 相差过大，那么牛顿方向可能不是下降方向，最优步长可能不为 1.也就是说有可能出现 $f(x^{(k+1)})>f(x^{(k)})$ 的情形.这时，应改用其他下降方向，如最速下降方向，再进行一维搜索.

牛顿法算法步骤如下：

(1) 给定初始点 $x^{(0)}$，ε 为事先给定的小正数，令 $k=0$.

(2) 计算 $\nabla f(x^{(k)})$，若 $\|\nabla f(x^{(k)})\|<\varepsilon$ 成立，则迭代停止，$x^{(k)}$ 即为所求；否则转(3).

(3) 计算 $[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}$，得 $d^{(k)}=-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)})$.

(4) 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+d^{(k)}$，$k=k+1$，返回(2).

可以证明，在适当的条件下，牛顿法的收敛速度估计式为

$$\|x^{(k+1)}-\bar{x}\|<\beta\|x^{(k)}-\bar{x}\|^2,$$

其中，$\bar{x}$ 为 $f(x)$ 的极小点，即牛顿法至少是二阶收敛的.

由此可见，牛顿法的突出优点是收敛速度快，当牛顿法应用于具有正定 Hessian 矩阵的二次函数时，只需一次迭代即可达到无约束全局极小点，表明牛顿法具备有限收敛性.

3.7.2 阻尼牛顿法

牛顿法要求目标函数二阶连续可微，而且在迭代过程中，进行矩阵求逆的运算也比较困

难.此外,牛顿法对初始点的选择要求高,当初始点 $x^{(0)}$接近极小点,牛顿法很有效,但当 $x^{(0)}$离极小点较远时,Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x^{(k)})$常常是奇异的,牛顿方向不存在.因此,应尽可能选择目标值较好的点作初始点.为了克服这个缺点,人们对算法作了修正,提出了"阻尼牛顿法",又称修正牛顿法(revised Newton method).

在牛顿法中,步长 t_k 总是取为 1.在阻尼牛顿法中,每步沿迭代方向

$$d^{(k)} = -[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)})$$

进行一维搜索来决定 t_k,即取 t_k 使

$$f(x^{(k)} + t_k d^{(k)}) = \min f(x^{(k)} + td^{(k)}),$$

得到阻尼牛顿法的迭代公式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}.$$

阻尼牛顿法保持了牛顿法快速收敛的优点,又不要求初始点选得很好,因而在实际应用中取得了较好的效果.

阻尼牛顿法算法步骤如下:

(1) 给定初始点 $x^{(0)}$,ε 为事先给定的小正数,令 $k=0$.

(2) 计算$\nabla f(x^{(k)})$,若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| < \varepsilon$ 成立,则迭代停止,$x^{(k)}$即为所求;否则转(3).

(3) 计算$[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}$,得 $d^{(k)} = -[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)})$.

(4) 沿 $d^{(k)}$进行一维搜索,即求解

$$f(x^{(k)} + t_k d^{(k)}) = \min f(x^{(k)} + td^{(k)}),$$

得到的 t_k 是一维搜索的最优解.

(5) 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}$, $k = k+1$,返回(2).

由于阻尼牛顿法含有一维搜索,因此每次迭代目标函数值一般有所下降.可以证明,阻尼牛顿法在适当的条件下具有全局收敛性,且为二阶收敛.

3.7.3 牛顿法的进一步修正

牛顿法和阻尼牛顿法虽然不同,但有共同缺点:由于可能出现 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x)$奇异的情形,因而不能确定后继点.此外,即使$\nabla^2 f(x)$非奇异,也未必正定,因而牛顿方向不一定是下降方向,这就可能导致算法失效.

为使牛顿法从任一点开始均能产生收敛于解集合的点列$\{x^{(k)}\}$,需要作进一步的修正.人们在这方面做了不少工作,共同的着眼点在于克服 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x)$非正定的困难.解决 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x)$非正定的问题的基本思想是:修正$\nabla^2 f(x)$,构造一个对称正定矩阵 G_k,用 G_k 取代矩阵$\nabla^2 f(x)$,从而得到在点 $x^{(k)}$处的下降方向

$$d^{(k)} = -G_k^{-1}\nabla f(x^{(k)}),$$

再沿此方向作一维搜索.

下面来构造矩阵 G_k.令 $G_k = \nabla^2 f(x^{(k)}) + \varepsilon_k I$,

其中,I 是 n 阶单位矩阵,ε_k 是个适当的正数.只要 ε_k 选择的合适,G_k 就是对称正定矩阵.

事实上,如果 λ_k 是$\nabla^2 f(x^{(k)})$的特征值,那么 $\lambda_k + \varepsilon_k$ 就是G_k 的特征值.只要 $\varepsilon_k > 0$ 取得足够大,G_k 的特征值便均为正数,从而保证了 G_k 的正定性.

3.8 共轭方向法

最速下降法计算步骤简单,但收敛速度太慢;牛顿法和阻尼牛顿法收敛速度快,但要计

算二阶偏导数矩阵及其逆阵，计算量太大.因此，人们希望找出一种算法，它要兼有这两种方法的优点，又能克服它们的缺点.共轭方向法就是这样一类方法，它比最速下降法的收敛速度快得多，同时又避免了牛顿法所要求的 Hessian 矩阵的计算和求逆.下面介绍共轭方向法(conjugate direction method)，首先引入共轭的概念.

定义 3.18 共轭(conjugate) 设 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 对称正定矩阵，若 E^n 中的两个方向 $\boldsymbol{d}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{d}^{(2)}$ 满足

$$\boldsymbol{d}^{(1)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}^{(2)}=0, \tag{3.8.1}$$

则称这两个方向 $\boldsymbol{d}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{d}^{(2)}$ 关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭，或称它们关于 $\boldsymbol{A}$ 正交.

若 $\boldsymbol{d}^{(1)},\boldsymbol{d}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{d}^{(k)}$ 是 E^n 中的 k 个方向，它们两两关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭，即满足

$$\boldsymbol{d}^{(i)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}^{(j)}=0,\quad i\neq j,\ i,j=1,\cdots,k, \tag{3.8.2}$$

则称这组方向是 $\boldsymbol{A}$ 共轭的，或称它们为 $\boldsymbol{A}$ 的 k 个共轭方向.

在上述定义中，如果 $\boldsymbol{A}$ 为单位矩阵，则两个方向关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭等价于两个方向正交.因此共轭是正交概念的推广.实际上，如果 $\boldsymbol{A}$ 是一般的对称正定矩阵，$\boldsymbol{d}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{d}^{(j)}$ 关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭，也就是方向 $\boldsymbol{d}^{(i)}$ 与方向 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}^{(j)}$ 正交.

现在，以正定二次函数为例，来观察两个方向关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭的几何意义.之所以以二次函数为例，是因为二次函数是一种简单的非线性函数，而一般的目标函数在极小点附近的性态又近似于二次函数.人们常常把二次函数作为衡量一个算法优劣的尺度.如果一种算法对于二次函数的效果尚且不好，就难以指望它对于一般函数会有更好的效果.因此，在研究算法时，常常是首先对二次函数进行分析，然后再推广到一般的目标函数.

设有二次函数

$$f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}). \tag{3.8.3}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 对称正定矩阵，$\bar{\boldsymbol{x}}$ 是一个定点.函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的等值面

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}})=c$$

是以 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 为中心的椭球面.由于

$$\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})=\boldsymbol{A}(\bar{\boldsymbol{x}}-\bar{\boldsymbol{x}})=\boldsymbol{0},$$

$\boldsymbol{A}$ 正定，因此 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的极小点.

设 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 是在某个等值面上的一点，该等值面在点 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 处的法向量为

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(1)})=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(1)}-\bar{\boldsymbol{x}}).$$

又设 $\boldsymbol{d}^{(1)}$ 是这个等值面在 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 处的一个切向量.记

$$\boldsymbol{d}^{(2)}=\bar{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}^{(1)}.$$

自然地，$\boldsymbol{d}^{(1)}$ 与 $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(1)})$ 正交，即 $\boldsymbol{d}^{(1)\mathrm{T}}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(1)})=0$，因此有 $\boldsymbol{d}^{(1)\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}^{(2)}=0$，即等值面上一点处的切向量与由这一点指向极小点的向量关于 $\boldsymbol{A}$ 共轭.

由此可知，(3.8.3)所定义的二次函数，若依次沿着 $\boldsymbol{d}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{d}^{(2)}$ 进行搜索，则经过两次迭代必达到极小点.

定理 3.34 设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶对称正定矩阵，$\boldsymbol{d}^{(1)},\boldsymbol{d}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{d}^{(k)}$ 是 k 个 $\boldsymbol{A}$ 共轭的非零向量，则这个向量组线性无关.

证明 设存在数 $a_1,a_2,\cdots,a_k$ 使得

$$\sum_{j=1}^{k}a_j\boldsymbol{d}^{(j)}=\boldsymbol{0}, \tag{3.8.4}$$

两端左乘 $d^{(i)T}A$，根据向量组关于 A 共轭的假设，得

$$a_i d^{(i)T} A d^{(i)} = 0. \tag{3.8.5}$$

由于 A 是正定矩阵，$d^{(i)}$是非零向量，因此在(3.8.5)中，$d^{(i)T}Ad^{(i)}>0$，从而得出

$$a_i = 0, \quad i = 1, \cdots, k.$$

因此 $d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$线性无关.

推论 在 n 维空间中，任一共轭向量组最多包含 n 个向量.

显然，若有 n 个非零向量 $d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(n)}$构成一个共轭向量组，则 E^n 中的任何向量均可由它们线性表出.

若 $m(m<n)$个向量是共轭的，则其所有线性组合的集合是一个 m 维的线性子空间. 例如在三维空间中，任意两个共轭向量都可以生成一个过原点的平面(二维线性子空间). 引入记号

$$L(x^{(1)}; d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}) = \left\{x \mid x = x^{(1)} + \sum_{i=1}^{m} t_i d^{(i)}, t_i \in (-\infty, +\infty)\right\},$$

定义 3.19 线性流形 设 $x^{(1)} \in E^n$，$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(m)}$是 E^n 中 m 个线性无关向量，则称集合 $L(x^{(1)}; d^{(1)}, \cdots, d^{(m)})$是由点 $x^{(1)}$和向量组$(d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(m)})$所生成的线性流形.

定理 3.35 扩张子空间定理 设有函数

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c.$$

其中，A 是 n 阶对称正定矩阵，$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$是 A 共轭的非零向量. 以任意的 $x^{(1)} \in E^n$ 为初始点，依次沿 $d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$进行一维搜索，得到点 $x^{(2)}, x^{(3)}, \cdots, x^{(k+1)}$，则 $x^{(k+1)}$是函数 $f(x)$在线性流形 $L(x^{(1)}; d^{(1)}, \cdots, d^{(k)})$上的唯一极小点. 特别地，当 $k=n$ 时，$x^{(n+1)}$是函数 $f(x)$在 E^n 上的唯一极小点.

证明 记

$$B_k = \left\{x \mid x = \sum_{i=1}^{k} t_i d^{(i)}, t_i \in (-\infty, +\infty)\right\},$$

则 B_k 是$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$生成的子空间.

由于 $f(x)$是严格凸函数，因此要证明 $x^{(k+1)}$是函数 $f(x)$在线性流形 $L(x^{(1)}; d^{(1)}, \cdots, d^{(k)})$上的唯一极小点，只需证明在点 $x^{(k+1)}$处，函数的梯度$\nabla f(x^{(k+1)})$与子空间 B_k 正交.

用归纳法证明$\nabla f(x^{k+1}) \perp B_k$. 为书写方便，以后在不致混淆的情况下，用 g_j 表示函数 $f(x)$在 $x^{(j)}$处的梯度，即

$$g_j = \nabla f(x^{(j)}). \tag{3.8.6}$$

证明 $g_{k+1} \perp B_k$，对 k 归纳.

当 $k=1$ 时，由一维搜索定义知 $g_2 \perp B_1$.

假设当 $k=m<n$ 时，$g_{m+1} \perp B_m$，证明 $g_{m+2} \perp B_{m+1}$. 由二次函数梯度的表达式和点 $x^{(k+1)}$的定义，有

$$\begin{aligned} g_{m+2} &= Ax^{(m+2)} + b \\ &= A(x^{(m+1)} + t_{m+1} d^{(m+1)}) + b \\ &= g_{m+1} + t_{m+1} A d^{(m+1)}. \end{aligned} \tag{3.8.7}$$

利用(3.8.7)可把 $d^{(i)}$和 g_{m+2}的内积写成

$$d^{(i)T}g_{m+2}=d^{(i)T}g_{m+1}+t_{m+1}d^{(i)T}Ad^{(m+1)}. \tag{3.8.8}$$

当 $i=m+1$ 时,由一维搜索定义可知

$$d^{(m+1)T}g_{m+2}=0; \tag{3.8.9}$$

当 $1\leqslant i<m+1$ 时,由归纳法假设,有

$$d^{(i)T}g_{m+1}=0. \tag{3.8.10}$$

由于 $d^{(1)},\cdots,d^{(m+1)}$关于 A 共轭,有

$$d^{(i)T}Ad^{(m+1)}=0. \tag{3.8.11}$$

由(3.8.8)~(3.8.11)可知

$$d^{(i)T}g_{m+2}=0,$$

即

$$g_{m+2}\perp B_{m+1}.$$

根据以上证明,$x^{(k+1)}$是 $f(x)$在线性流形 $L(x^{(1)};d^{(1)},\cdots,d^{(k)})$上的极小点.由于 $f(x)$是严格凸函数,因此点 $x^{(k+1)}$必是此流形上的唯一极小点.

当 $k=n$ 时,$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(n)}$是 E^n 的一组基,此时必有 $g_{n+1}=\mathbf{0}$,这是显然的.如果 $g_{n+1}\neq\mathbf{0}$,则有

$$g_{n+1}=a_1d^{(1)}+\cdots+a_nd^{(n)}.$$

等号两端左乘 $g_{n+1}^{\mathrm T}$,则等号左端大于零,等号右端等于零,这是不可能的.由于 $g_{n+1}=\mathbf{0}$,因此,$x^{(n+1)}$是函数 $f(x)$在 E^n 上的唯一极小点.

推论 在定理 3.35 的条件下,必有

$$g_{k+1}^{\mathrm T}d^{(j)}=0,\quad \forall j\leqslant k.$$

上述定理表明,只要能选取一组共轭方向 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(n)}$,就可以在 n 步之内求得二次凸函数的极小点,称这种算法为共轭方向法.共轭方向法具有有限收敛性.

共轭方向法,主要是其中的共轭梯度法(conjugate gradient method).1952 年,Hesteness 和 Stiefel 为求解线性方程组而提出了共轭梯度法.后来,人们把这种方法用于求解无约束优化问题.1964 年,Fletcher 和 Reeves 提出了 F-R 共轭梯度法,简称 FR 法.

FR 法的基本思想是把共轭性与最速下降方法相结合,利用已知点处的梯度构造一组共轭方向,并沿这组方向进行搜索,求出目标函数的极小点.根据共轭方向的基本性质,这种方法具有二次终止性.

先讨论对于二次凸函数的共轭梯度法,然后再把这种方法推广到极小化一般函数的情形.

考虑问题

$$\min\quad f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm T}Ax+b^{\mathrm T}x+c. \tag{3.8.12}$$

其中,$x\in E^n$,A 是对称正定矩阵,c 是常数.

具体求解方法如下.

首先,任意给定一个初始点 $x^{(1)}$,计算出目标函数 $f(x)$在这点的梯度,若 $\|g_1\|=0$,则停止计算;否则,令

$$d^{(1)}=-\nabla f(x^{(1)})=-g_1, \tag{3.8.13}$$

沿方向 $d^{(1)}$搜索,得到点 $x^{(2)}$.计算在 $x^{(2)}$处的梯度,若 $\|g_2\|\neq0$,则利用 $-g_2$ 和 $d^{(1)}$构造

第二个搜索方向 $d^{(2)}$，再沿 $d^{(2)}$搜索.

一般地，若已知点 $x^{(k)}$和搜索方向 $d^{(k)}$，则从 $x^{(k)}$出发，沿 $d^{(k)}$进行搜索，得

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_k d^{(k)}. \tag{3.8.14}$$

其中，步长 t_k 满足

$$f(x^{(k)}+t_k d^{(k)})=\min f(x^{(k)}+td^{(k)}),$$

可以求出 t_k 的显式表达式. 令

$$\varphi(t)=f(x^{(k)}+td^{(k)}),$$

求 $\varphi(t)$的极小点，令

$$\varphi'(t)=\nabla f(x^{(k+1)})^{\mathrm{T}}d^{(k)}=0. \tag{3.8.15}$$

根据二次函数的梯度的表达式，(3.8.15)即

$$(Ax^{(k+1)}+b)^{\mathrm{T}}d^{(k)}=0,$$

$$(A(x^{(k)}+t_k d^{(k)})+b)^{\mathrm{T}}d^{(k)}=0,$$

$$(g_k+t_k Ad^{(k)})^{\mathrm{T}}d^{(k)}=0, \tag{3.8.16}$$

由(3.8.16)得

$$t_k=-\frac{g_k^{\mathrm{T}}d^{(k)}}{d^{(k)\mathrm{T}}Ad^{(k)}}. \tag{3.8.17}$$

计算 $f(x)$在 $x^{(k+1)}$处的梯度. 若 $\|g_{k+1}\|=0$，则停止计算；否则，用 $-g_{k+1}$和 $d^{(k)}$构造下一个搜索方向 $d^{(k+1)}$，并使 $d^{(k+1)}$和 $d^{(k)}$关于 A 共轭. 构造

$$d^{(k+1)}=-g_{k+1}+\alpha_k d^{(k)}, \tag{3.8.18}$$

两端左乘 $d^{(k)\mathrm{T}}A$，并令

$$d^{(k)\mathrm{T}}Ad^{(k+1)}=-d^{(k)\mathrm{T}}Ag_{k+1}+\alpha_k d^{(k)\mathrm{T}}Ad^{(k)}=0,$$

由此得

$$\alpha_k=\frac{d^{(k)\mathrm{T}}Ag_{k+1}}{d^{(k)\mathrm{T}}Ad^{(k)}}. \tag{3.8.19}$$

再从 $x^{(k+1)}$出发，沿方向 $d^{(k+1)}$搜索.

综上分析，在第一个搜索方向取负梯度的前提下，重复使用(3.8.14)，(3.8.17)，(3.8.18)和(3.8.19)，就能伴随计算点的增加，构造出一组搜索方向.

定理 3.36 对于正定二次函数(3.8.12)，具有精确一维搜索的 FR 法在 $m\leqslant n$ 次一维搜索后即终止，并且对所有 $i(1\leqslant i\leqslant m)$，下列关系成立：

(1) $d^{(i)\mathrm{T}}Ad^{(j)}=0,\quad j=1,2,\cdots,i-1;$

(2) $g_i^{\mathrm{T}}g_j=0,\quad j=1,2,\cdots,i-1;$

(3) $g_i^{\mathrm{T}}d^{(i)}=-g_i^{\mathrm{T}}g_i.$

证明 显然 $m\geqslant 1$. 现在用归纳法证明上述三个关系，对 i 归纳.

当 $i=1$ 时，由于 $d^{(1)}=-g_1$，因此(3)成立；

当 $i=2$ 时，关系(1)和(2)成立，从而(3)也成立.

设对某个 $i<m$，这些关系均成立，证明对于 $i+1$ 也成立.

先证(2)，由迭代公式

$$x^{(i+1)}=x^{(i)}+t_i d^{(i)},$$

两端左乘 A，再加上 b，得

$$g_{i+1}=g_i+t_i Ad^{(i)}. \tag{3.8.20}$$

其中，t_i 由(3.8.17)确定，即

$$t_i = -\frac{g_i^{\mathrm{T}} d^{(i)}}{d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(i)}} = \frac{g_i^{\mathrm{T}} g_i}{d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(i)}} \neq 0. \tag{3.8.21}$$

考虑到(3.8.18)和(3.8.20)，则

$$\begin{aligned} g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_j &= (g_i + t_i A d^{(i)})^{\mathrm{T}} g_j \\ &= g_i^{\mathrm{T}} g_j + t_i d^{(i)\mathrm{T}} A(-d^{(j)} + \alpha_{j-1} d^{(j-1)}). \end{aligned} \tag{3.8.22}$$

(注意，当 $j=1$ 时，式(3.8.22)应改写成 $g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_1 = g_i^{\mathrm{T}} g_1 - t_i d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(1)}$)

当 $j=i$ 时，由归纳法假设 $d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(i-1)} = 0$，根据(3.8.21)，有

$$-t_i d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(i)} = -g_i^{\mathrm{T}} g_i,$$

因此
$$g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_i = 0.$$

当 $j<i$ 时，根据归纳法假设，(3.8.22)等号右端各项均为零，因此 $g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_j = 0$.

再证(1)，运用(3.8.18)和(3.8.20)，则

$$\begin{aligned} d^{(i+1)\mathrm{T}} A d^{(j)} &= (-g_{i+1} + \alpha_i d^{(i)})^{\mathrm{T}} A d^{(j)} \\ &= -g_{i+1}^{\mathrm{T}} \frac{g_{j+1} - g_j}{t_j} + \alpha_i d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(j)}. \end{aligned}$$

当 $j=i$ 时，把(3.8.19)代入上式第一个等号的右端，即得

$$d^{(i+1)\mathrm{T}} A d^{(j)} = 0.$$

当 $j<i$ 时，由前面已经证明的结论和归纳法假设，式中第二个等号右端显然为零，因此

$$d^{(i+1)\mathrm{T}} A d^{(j)} = 0.$$

最后证(3)，易知

$$g_{i+1}^{\mathrm{T}} d^{(i+1)} = g_{i+1}^{\mathrm{T}}(-g_{i+1} + \alpha_i d^{(i)}) = -g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_{i+1}.$$

综上所证，对于 $i+1$，三种关系也成立.

由上述证明可知，FR 法所产生的搜索方向 $d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(m)}$ 是 A 共轭的，根据定理 3.35，经有限步迭代必达极小点.

这里要着重指出，初始搜索方向选择最速下降方向($d^{(1)} = -\nabla f(x^{(1)})$)十分重要. 如果选择别的方向作为初始方向，其余方向均按 FR 法构造，那么极小化正定二次函数时，这样构造出来的一组方向并不能保证共轭性.

定理 3.37 对于正定二次函数，FR 法中因子为

$$\alpha_i = \frac{\| g_{i+1} \|^2}{\| g_i \|^2}, \quad i \geqslant 1, g_i \neq \mathbf{0}.$$

证明 利用已有知识，直接推导如下：

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \frac{d^{(i)\mathrm{T}} A g_{i+1}}{d^{(i)\mathrm{T}} A d^{(i)}} = \frac{g_{i+1}^{\mathrm{T}} A(x^{(i+1)} - x^{(i)})/t_i}{d^{(i)\mathrm{T}} A(x^{(i+1)} - x^{(i)})/t_i} \\ &= \frac{g_{i+1}^{\mathrm{T}}(g_{i+1} - g_i)}{d^{(i)\mathrm{T}}(g_{i+1} - g_i)} = \frac{g_{i+1}^{\mathrm{T}} g_{i+1}}{-d^{(i)\mathrm{T}} g_i} = \frac{\| g_{i+1} \|^2}{-d^{(i)\mathrm{T}} g_i}. \end{aligned} \tag{3.8.23}$$

根据定理 3.36，$d^{(i)\mathrm{T}} g_i = -\| g_i \|^2$，因此

$$\alpha_i = \frac{\| g_{i+1} \|^2}{\| g_i \|^2}. \tag{3.8.24}$$

对于二次凸函数，FR 法的计算步骤如下：

(1) 给定初始点 $x^{(1)}$，令 $k=1$.

(2) 计算 $g_k=\nabla f(x^{(k)})$，若 $\|g_k\|=0$，则停止计算，得点 $\bar{x}=x^{(k)}$；否则，转(3).

(3) 构造搜索方向，令

$$d^{(k)}=-g_k+\alpha_{k-1}d^{(k-1)}.$$

其中，当 $k=1$ 时，$\alpha_{k-1}=0$；当 $k>1$ 时，按(3.8.24)计算因子 α_{k-1}.

(4) 令

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}.$$

其中，按(3.8.17)计算步长 t_k.

(5) 若 $k=n$，则停止计算，得点 $\bar{x}=x^{(k+1)}$；否则，令 $k=k+1$，转步(2).

对于任意函数 $f(x)$，需要对上述用于二次函数的共轭梯度法进行推广. 推广后的共轭梯度法，与原来方法的主要差别是，步长 t_k 不能再用(3.8.17)计算，必须用其他一维搜索方法确定. 此外，凡用到矩阵 A 之处，需要用现行点处的 Hessian 矩阵 $\nabla^2f(x^{(k)})$. 显然，用这种方法求任意函数的极小点，一般来说，通过有限步迭代是达不到的. 迭代的延续可以采取不同的方案. 一种是直接延续，即总是用(3.8.18)构造搜索方向；一种是把 n 步作为一轮，每搜索一轮之后，取一次最速下降方向，开始下一轮. 后一种策略称为"重新开始"或"重置". 每 n 次迭代后以最速下降方向重新开始的共轭梯度法，有时称为传统的共轭梯度法.

下面给出 FR 法的算法。

(1) 给定初始点 $x^{(1)}$，允许误差 $\epsilon>0$. 置

$$y^{(1)}=x^{(1)},\ d^{(1)}=-\nabla f(y^{(1)}),\quad k=j=0.$$

(2) 如果 $\|\nabla f(y^{(j)})\|<\epsilon$，则停止计算；否则，作一维搜索，求 t_j，满足

$$f(y^{(j)}+t_jd^{(j)})=\min f(y^{(j)}+td^{(j)}),$$

令

$$y^{(j+1)}=y^{(j)}+t_jd^{(j)}.$$

(3) 如果 $j<n$，转(4)；否则，转(5).

(4) 令

$$d^{(j+1)}=-\nabla f(y^{(j+1)})+\alpha_jd^{(j)},$$

其中，

$$\alpha_j=\frac{\|\nabla f(y^{(j+1)})\|^2}{\|\nabla f(y^{(j)})\|^2}.$$

令 $j=j+1$，转(2).

(5) 令 $x^{(k+1)}=y^{(n+1)}$，$y^{(1)}=x^{(k+1)}$，$d^{(1)}=-\nabla f(y^{(1)})$，$j=1$，$k=k+1$，转(2).

这里还应指出，在共轭梯度法中，可以采用不同的公式计算因子 α_j. 除了(3.8.24)外，还有以下几种常见的形式：

(1)
$$\alpha_j=\frac{g_{j+1}^{\mathrm{T}}(g_{j+1}-g_j)}{g_j^{\mathrm{T}}g_j},\tag{3.8.25}$$

(2)
$$\alpha_j=\frac{g_{j+1}^{\mathrm{T}}(g_{j+1}-g_j)}{d^{(j)\mathrm{T}}(g_{j+1}-g_j)},\tag{3.8.26}$$

(3)
$$\alpha_j=\frac{d^{(j)\mathrm{T}}\nabla^2f(x^{(j+1)})g_{j+1}}{d^{(j)\mathrm{T}}\nabla^2f(x^{(j+1)})d^{(j)}}.\tag{3.8.27}$$

(3.8.25)是由 Polak, Ribiere 和 Polyar 提出的，使用这个公式的共轭梯度法，称为 PRP 共轭梯度法. (3.8.26)由 Sorenson 和 Wolfe 提出，(3.8.27)由 Daniel 提出. 当极小化正定二次函数初始搜索方向取负梯度时，从(3.8.24)～(3.8.27)是等价的，这由 FR 法的推导过程显而易见. 但是，用于一般函数时，得到的搜索方向是不同的.

此外，Crowder 和 Wolfe 证明，一般来说，共轭梯度法的收敛速率不坏于最速下降法. 他

们还证明了，不用标准初始方向 $d^{(1)}=-\nabla f(x^{(1)})$时，共轭梯度法的收敛速率可能像线性速率那样慢．但是，共轭梯度法的一个主要优点是存贮量比较小．事实上，FR 法只需存贮 3 个 n 维向量．因此，求解变量多的大规模问题时，可用共轭梯度法．

3.9 拟牛顿法

前面介绍了牛顿法，它的突出优点是收敛很快．但是，运用牛顿法需要计算二阶偏导数，而目标函数的 Hessian 矩阵可能非正定．为了克服牛顿法的缺点，人们提出了拟牛顿法(quasi-Newton methods)．它的基本思想是用不含二阶导数的矩阵近似代替牛顿法中的 Hessian 矩阵的逆矩阵．由于构造近似矩阵的方法不同，因而出现不同的拟牛顿法．经理论证明和实践检验，拟牛顿法已成为一类公认的比较有效的算法．

下面分析怎样构造近似矩阵并用它取代牛顿法中的 Hessian 矩阵的逆．

前面已给出牛顿法的迭代公式，即

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_k d^{(k)}. \tag{3.9.1}$$

其中，$d^{(k)}$是在点 $x^{(k)}$处的牛顿方向，有

$$d^{(k)}=-[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}\nabla f(x^{(k)}). \tag{3.9.2}$$

t_k 是从$x^{(k)}$出发沿牛顿方向搜索的最优步长．

构造$[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}$的近似矩阵 H_k，得

$$d^{(k)}=-H_k\nabla f(x^{(k)}),$$

称之为点 $x^{(k)}$处的拟牛顿方向(quasi-Newton direction)．

先分析$[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1}$与一阶导数的关系．

设在第 k 次迭代后，得到点 $x^{(k+1)}$，将目标函数 $f(x)$在点 $x^{(k+1)}$展成 Taylor 级数，并取二阶近似，得

$$f(x)\approx f(x^{(k+1)})+\nabla f(x^{(k+1)})^{\mathrm T}(x-x^{(k+1)})+\frac{1}{2}(x-x^{(k+1)})^{\mathrm T}\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x-x^{(k+1)}).$$

由此可知，在 $x^{(k+1)}$附近有

$$\nabla f(x)\approx\nabla f(x^{(k+1)})+\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x-x^{(k+1)}).$$

令 $x=x^{(k)}$，则

$$\nabla f(x^{(k)})\approx\nabla f(x^{(k+1)})+\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x^{(k)}-x^{(k+1)}).$$

简记为

$$p^{(k)}=x^{(k+1)}-x^{(k)}, \tag{3.9.3}$$

$$q^{(k)}=\nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)}). \tag{3.9.4}$$

则有

$$q^{(k)}\approx\nabla^2 f(x^{(k+1)})p^{(k)}. \tag{3.9.5}$$

又设 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x^{(k+1)})$可逆，则

$$p^{(k)}\approx[\nabla^2 f(x^{(k+1)})]^{-1}q^{(k)}. \tag{3.9.6}$$

这样，计算 $p^{(k)}$和 $q^{(k)}$后，可以根据(3.9.6)估计在 $x^{(k+1)}$处的 Hessian 矩阵的逆．因此，为了用不包含二阶导数的矩阵 H_{k+1}取代牛顿法中的 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x^{(k+1)})$的逆矩阵，有理由令 H_{k+1}满足

$$p^{(k)}=H_{k+1}q^{(k)}. \tag{3.9.7}$$

有时称(3.9.7)为拟牛顿条件(quasi-Newton condition).

显然,若想使拟牛顿方向 $-H_k\nabla f(x^{(k)})$较好地近似于牛顿方向,下列基本条件应当得到满足:

(1) $d^{(k)}=-H_k\nabla f(x^{(k)})$是目标函数 $f(x)$在点 $x^{(k)}$的下降方向;

(2) H_{k+1}满足 $p^{(k)}=H_{k+1}q^{(k)}$;

(3) H_k 与 H_{k+1}之间应具有某种简单的迭代关系.

为满足条件(3),常用的办法是使

$$H_{k+1}=H_k+E_k. \tag{3.9.8}$$

其中,E_k 是一个容易计算的矩阵,称之为校正矩阵,代入(3.9.7),即得

$$p^{(k)}=(H_k+E_k)q^{(k)}.$$

如果能有

$$\nabla f(x^{(k)})^{\mathrm{T}}[-H_k\nabla f(x^{(k)})]<0,$$

即

$$\nabla f(x^{(k)})^{\mathrm{T}}H_k\nabla f(x^{(k)})>0,$$

则拟牛顿方向必是下降方向.可见,若 H_k 正定,即可满足要求.

拟牛顿法的基本格式如下.

设 $f(x)$是 n 元可微函数:

(1) 选取初始点 $x^{(1)}$,初始正定矩阵 H_1(通常,令 H_1 为单位矩阵 I),令 $k=1$.

(2) $d^{(k)}=-H_k\nabla f(x^{(k)})$.

(3) 求解一维搜索问题

$$\min \quad f(x^{(k)}+td^{(k)}).$$

设 t_k 为最优步长,令

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}.$$

(4) 如果 $x^{(k+1)}$满足迭代终止准则,输出 $x^{(k+1)}$,计算终止;否则,转(5).

(5) 构造 E_k,使满足拟牛顿条件,令

$$H_{k+1}=H_k+E_k.$$

(6) 若$\nabla f(x^{(k)})^{\mathrm{T}}H_k\nabla f(x^{(k)})>0$,令 $k=k+1$,转(2);否则,令 $d^{(k+1)}=-\nabla f(x^{(k+1)})$,$k=k+1$,转(3).

当然,构造校正矩阵的方法很多,每一种特殊的构造方法对应一种特殊的拟牛顿法.因而,拟牛顿法不是指一种具体的算法,而是一族算法.本书将介绍其中几种有代表性的算法.

3.9.1 对称秩 1 算法

对称秩 1 算法中,校正矩阵 E_k 的构造方法如下.

令

$$E_k=\alpha_ku^{(k)}u^{(k)\mathrm{T}}, \tag{3.9.9}$$

其中,α_k 是待定的数,$u^{(k)}$是待定的向量.

将(3.9.9)代入拟牛顿条件

$$(H_k+\alpha_ku^{(k)}u^{(k)\mathrm{T}})q^{(k)}=p^{(k)}, \tag{3.9.10}$$

即

$$\alpha_ku^{(k)}u^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}=p^{(k)}-H_kq^{(k)}.$$

注意到 $u^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}$是数,如果取

$$u^{(k)} = p^{(k)} - H_k q^{(k)},$$

$$\alpha_k u^{(k)\mathrm{T}} q^{(k)} = 1,$$

则(3.9.9)可得到满足,且可确定 α_k 的值为

$$\alpha_k = \frac{1}{u^{(k)\mathrm{T}} q^{(k)}} = \frac{1}{q^{(k)\mathrm{T}}(p^{(k)} - H_k q^{(k)})}.$$

于是校正矩阵可取为

$$E_k = \frac{(p^{(k)} - H_k q^{(k)})(p^{(k)} - H_k q^{(k)})^{\mathrm{T}}}{q^{(k)\mathrm{T}}(p^{(k)} - H_k q^{(k)})}. \tag{3.9.11}$$

将(3.9.11)所确定的校正矩阵 E_k 代入拟牛顿法的基本格式的第(5)步,则所得的算法即为对称秩 1 算法,此时

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(p^{(k)} - H_k q^{(k)})(p^{(k)} - H_k q^{(k)})^{\mathrm{T}}}{q^{(k)\mathrm{T}}(p^{(k)} - H_k q^{(k)})}.$$

对称秩 1 算法的性质如下:

(1) 由(3.9.9),可知校正矩阵 E_k 是对称的,且秩为 1,由于 H_1 对称正定,从而必有 H_{k+1} 对称.

(2) 设目标函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}x + c$, A 正定,可以证明,搜索方向 $d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots d^{(n)}$ 关于 A 共轭,从而表明对称秩 1 算法具备有限收敛性.

(3) 在(2)的条件下,还可以证明

$$H_n = A^{-1}.$$

(4) 可以证明,对称秩 1 算法具有超线性收敛速度.

然而,运用秩 1 矩阵校正,也存在一些困难.首先,仅当

$$q^{(k)\mathrm{T}}(p^{(k)} - H_k q^{(k)}) > 0$$

时,H_{k+1} 才能确保正定性,而这一点是没有保证的.即使

$$q^{(k)\mathrm{T}}(p^{(k)} - H_k q^{(k)}) > 0,$$

由于舍入误差的影响,可能导致 E_k 无界,从而产生数值计算上的困难.因此这种方法有某种局限性.

3.9.2 DFP 算法

DFP 算法全称 Davidon-Fletcher-Powell 算法,是由 Davidon 首先提出,后来又由 Fletcher 和 Powell 改进的算法,又称为变尺度法,是求解无约束极小化问题的最有效的算法之一,也是一种拟牛顿法.

DFP 算法中,校正矩阵 E_k 的构造公式为

$$E_k = \frac{p^{(k)} p^{(k)\mathrm{T}}}{p^{(k)\mathrm{T}} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)\mathrm{T}} H_k}{q^{(k)} H_k q^{(k)}}. \tag{3.9.12}$$

推导过程如下:令

$$E_k = \alpha_k u^{(k)} u^{(k)\mathrm{T}} + \beta_k v^{(k)} v^{(k)\mathrm{T}}. \tag{3.9.13}$$

其中 α_k, β_k 是待定数;$u^{(k)}, v^{(k)}$ 是待定向量.

将(3.9.13)代入拟牛顿条件,得

$$(\alpha_k u^{(k)} u^{(k)T} + \beta_k v^{(k)} v^{(k)T}) q^{(k)} = p^{(k)} - H_k q^{(k)},$$

$$\alpha_k u^{(k)} u^{(k)T} q^{(k)} + \beta_k v^{(k)} v^{(k)T} q^{(k)} = p^{(k)} - H_k q^{(k)}.$$

分别令

$$\alpha_k u^{(k)} u^{(k)T} q^{(k)} = p^{(k)}, \beta_k v^{(k)} v^{(k)T} q^{(k)} = -H_k q^{(k)}.$$

注意到 $u^{(k)T}q^{(k)}$, $v^{(k)T}q^{(k)}$是数,故可令

$$\begin{cases} u^{(k)} = p^{(k)}, \\ \alpha_k u^{(k)T} q^{(k)} = 1; \end{cases} \qquad \begin{cases} v^{(k)} = H_k q^{(k)}, \\ \beta_k v^{(k)T} q^{(k)} = -1. \end{cases}$$

于是有

$$\alpha_k = \frac{1}{u^{(k)T} q^{(k)}} = \frac{1}{p^{(k)T} q^{(k)}},$$

$$\beta_k = \frac{-1}{v^{(k)T} q^{(k)}} = \frac{-1}{q^{(k)T} H_k q^{(k)}}.$$

将 α_k, $u^{(k)}$, β_k, $v^{(k)}$代入(3.9.13),即得(3.9.12).

将(3.9.12)所确定的校正矩阵 E_k 代入拟牛顿法的基本格式的第(5)步,则所得的算法即为 DFP 算法,此时 $H_{k+1} = H_k + \frac{p^{(k)} p^{(k)T}}{p^{(k)T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)T} H_k}{q^{(k)} H_k q^{(k)}}$,称之为 DFP 公式.

定理 3.38 用 DFP 算法求解

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c.$$

其中,A 是 n 阶对称正定矩阵.取初点 $x^{(1)} \in E^n$,令 H_1 是 n 阶对称正定矩阵,则

(1) $$p^{(i)T} A p^{(j)} = 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant j \leqslant k, \tag{3.9.14}$$

(2) $$H_{k+1} A p^{(i)} = p^{(i)}, \quad 1 \leqslant i \leqslant k. \tag{3.9.15}$$

其中,$p^{(i)} = x^{(i+1)} - x^{(i)} = t_i d^{(i)}$, $t_i \neq 0$, $k \leqslant n$.

证明 用归纳法,对 k 归纳.

当 $k=1$ 时,有

$$H_2 A p^{(1)} = \left(H_1 + \frac{p^{(1)} p^{(1)T}}{p^{(1)T} q^{(1)}} - \frac{H_1 q^{(1)} q^{(1)T} H_1}{q^{(1)T} H_1 q^{(1)}} \right) A p^{(1)}. \tag{3.9.16}$$

由于

$$\begin{aligned} A p^{(i)} &= A(x^{(i+1)} - x^{(i)}) \\ &= g_{i+1} - g_i = q^{(i)}, \end{aligned} \tag{3.9.17}$$

可知 $Ap^{(1)} = q^{(1)}$,代入(3.9.16),得

$$H_2 A p^{(1)} = p^{(1)},$$

即(3.9.15)成立.

当 $k=2$ 时,利用上述结果易证(3.9.14)成立.具体推证为

$$\begin{aligned} p^{(1)T} A p^{(2)} &= p^{(1)T} A(-t_2 H_2 g_2) \\ &= -t_2 g_2^T H_2 A p^{(1)} \\ &= -t_2 g_2^T p^{(1)} = 0. \end{aligned}$$

由此结果易证,当 $k=2$ 时,(3.9.15)也成立.

现在,设 $k=m$ 时,(3.9.14)和(3.9.15)成立,证明当 $k=m+1$ 时这些关系也成立.

先证 $k=m+1$ 时,(3.9.14)成立.根据归纳法假设,只需证明 $p^{(m+1)}$ 与 $p^{(1)},\cdots,p^{(m)}$ 中每一个关于 A 共轭.根据关于(3.9.15)的归纳法假设,当 $1\leqslant i\leqslant m$ 时,有

$$H_{m+1}Ap^{(i)}=p^{(i)}.$$

利用此条件,则

$$\begin{aligned}p^{(i)\mathrm{T}}Ap^{(m+1)}&=p^{(i)\mathrm{T}}A(-t_{m+1}H_{m+1}g_{m+1})\\&=-t_{m+1}g_{m+1}^{\mathrm{T}}H_{m+1}Ap^{(i)}\\&=-t_{m+1}g_{m+1}^{\mathrm{T}}p^{(i)}\\&=-t_{m+1}t_ig_{m+1}^{\mathrm{T}}d^{(i)}.\end{aligned}\tag{3.9.18}$$

根据定理 3.35 的推论,有

$$g_{m+1}^{\mathrm{T}}d^{(i)}=0,\quad i<m+1.$$

因此,由(3.9.18)可知

$$p^{(i)\mathrm{T}}Ap^{(m+1)}=0.$$

再证当 $k=m+1$ 时,(3.9.15)成立.

当 $1\leqslant i\leqslant m+1$ 时,有

$$H_{m+2}Ap^{(i)}=\left(H_{m+1}+\frac{p^{(m+1)}p^{(m+1)\mathrm{T}}}{p^{(m+1)\mathrm{T}}q^{(m+1)}}-\frac{H_{m+1}q^{(m+1)}q^{(m+1)\mathrm{T}}H_{m+1}}{q^{(m+1)\mathrm{T}}H_{m+1}q^{(m+1)}}\right)Ap^{(i)}.\tag{3.9.19}$$

当 $i=m+1$ 时,由(3.9.17)知,$Ap^{(m+1)}=q^{(m+1)}$,代入(3.9.19),则

$$H_{m+2}Ap^{(m+1)}=p^{(m+1)}.$$

当 $i<m+1$ 时,根据(3.9.15)的归纳法假设及(3.9.14)当 $k=m+1$ 时成立的事实,并考虑到(3.9.17),则有

$$q^{(m+1)}H_{m+1}Ap^{(i)}=q^{(m+1)\mathrm{T}}p^{(i)}=p^{(m+1)\mathrm{T}}Ap^{(i)}=0.$$

因此,在(3.9.19)中,将 $Ap^{(i)}$ 乘括号内各项,则有

$$H_{m+2}Ap^{(i)}=H_{m+1}Ap^{(i)}=p^{(i)}.$$

推论 在定理 3.38 的条件下,必有 $H_{n+1}=A^{-1}$.

证明 令

$$D=(p^{(1)},p^{(2)},\cdots,p^{(n)}),$$

则由(3.9.15),有

$$H_{n+1}AD=D.\tag{3.9.20}$$

由于 $p^{(1)},p^{(2)},\cdots,p^{(n)}$ 是一组关于 A 共轭的非零向量,因此它们是线性无关的,从而 D 是可逆矩阵,由(3.9.20),得

$$H_{n+1}A=I,$$

故 $H_{n+1}=A^{-1}$.

由于 $p^{(i)}=t_id^{(i)}$,因此 $p^{(1)},p^{(2)},\cdots,p^{(k)}$ 关于 A 共轭等价于 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$ 关于 A 共轭.可见,DFP 算法中构造出来的搜索方向是一组 A 共轭方向,DFP 方法具有二次终止性.

3.9.3 BFGS 公式及 Broyden 族

前面利用拟牛顿条件(3.9.7)导出了 DFP 公式.下面,用不含二阶导数的矩阵 B_{k+1} 近

似 Hessian 矩阵$\nabla^2 f(x^{(k+1)})$，从而由(3.9.5)给出另一种形式的拟牛顿条件，即

$$q^{(k)}=B_{k+1}p^{(k)}. \tag{3.9.21}$$

在(3.9.7)中，用 B_{k+1}取代 H_{k+1}，同时交换 $p^{(k)}$和 $q^{(k)}$，恰好得出(3.9.21)，因此，只需在 H_k 的递推公式中互换$p^{(k)}$和 $q^{(k)}$，并用 B_{k+1}和 B_k 分别取代H_{k+1}和 H_k，就得到 B_k 的递推公式，而不必从(3.9.21)出发另行推导.这样，关于 B_k 的修正公式为

$$B_{k+1}=B_k+\frac{q^{(k)}q^{(k)\mathrm{T}}}{q^{(k)\mathrm{T}}p^{(k)}}-\frac{B_kp^{(k)}p^{(k)\mathrm{T}}B_k}{p^{(k)\mathrm{T}}B_kp^{(k)}}. \tag{3.9.22}$$

(3.9.22)称为关于矩阵 B 的 BFGS 修正公式，有时也称为 DFP 公式的对偶公式.

设 B_{k+1}可逆，则由(3.9.21)可知

$$p^{(k)}=B_{k+1}^{-1}q^{(k)},$$

此式表明，B_{k+1}^{-1}满足拟牛顿条件(3.9.7)，因此可令

$$H_{k+1}=B_{k+1}^{-1}. \tag{3.9.23}$$

这样，可以由(3.9.22)出发，求 B_{k+1}^{-1}，从而得到关于 H 的 BFGS 公式

$$H_{k+1}^{\mathrm{BFGS}}=H_k+\left(1+\frac{q^{(k)\mathrm{T}}H_kq^{(k)}}{p^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}}\right)\frac{p^{(k)}p^{(k)\mathrm{T}}}{p^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}}-\frac{p^{(k)}q^{(k)\mathrm{T}}H_k+H_kq^{(k)}p^{(k)\mathrm{T}}}{p^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}}. \tag{3.9.24}$$

这个重要的公式是由 Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shanno 于 1970 年提出的，它可以像 DFP 公式一样使用，而且数值计算经验表明，它比 DFP 公式的效果还好，因此目前得到广泛应用.

DFP 和 BFGS 公式都由 $p^{(k)}$和 $H_kq^{(k)}$构成的对称秩 2 校正，因此这两个公式的加权组合仍具有同样的形式，这就自然导致考虑所有这类修正公式组成的集合，于是定义

$$H_{k+1}^{\varphi}=(1-\varphi)H_{k+1}^{\mathrm{DFP}}+\varphi H_{k+1}^{\mathrm{BFGS}} \tag{3.9.25}$$

其中，φ 是一个参数，可取任意实数.显然，当 $\varphi=0$ 和 $\varphi=1$ 时，(3.9.25)分别是 DFP 修正和 BFGS 修正.(3.9.25)所给出的修正公式的全体称为 Broyden 族.可以证明，对称秩 1 校正也是这个族的成员.若将 DFP 公式和 BFGS 公式代入(3.9.25)，则得到 Broyden 族的显式表达：

$$\begin{aligned}H_{k+1}^{\varphi}&=H_k+\frac{p^{(k)}p^{(k)\mathrm{T}}}{p^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}}-\frac{H_kq^{(k)}q^{(k)\mathrm{T}}H_k}{q^{(k)\mathrm{T}}H_kq^{(k)}}+\varphi v^{(k)}v^{(k)\mathrm{T}}\\&=H_{k+1}^{\mathrm{DFP}}+\varphi v^{(k)}v^{(k)\mathrm{T}}.\end{aligned} \tag{3.9.26}$$

其中，

$$v^{(k)}=(q^{(k)\mathrm{T}}H_kq^{(k)})^{\frac{1}{2}}\left(\frac{p^{(k)}}{p^{(k)\mathrm{T}}q^{(k)}}-\frac{H_kq^{(k)}}{q^{(k)\mathrm{T}}H_kq^{(k)}}\right). \tag{3.9.27}$$

在拟牛顿法的每次迭代中，可用 Broyden 族的一个成员作为一个修正公式.

由于 DFP 和 BFGS 修正都满足拟牛顿条件(3.9.7)，因此 Broyden 族的所有成员均满足这个条件.进而，DFP 方法所具有的许多性质，Broyden 方法也具有.下列定理就是定理 3.38 的直接推广.

定理 3.39 设 $f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x+c$，其中 A 是n 阶对称正定矩阵，则对于 Broyden 方法，成立

(1) $p^{(i)\mathrm{T}}Ap^{(j)}=0,\quad 1\leqslant i<j\leqslant k,$

(2) $H_{k+1}Ap^{(i)}=p^{(i)}$, $1\leqslant i\leqslant k$.
证明方法与定理3.38的证明类似，这里从略.

值得注意，Broyden族并非对 φ 的所有取值都能保持正定性.事实上，当 $\varphi<0$ 时，H^{φ} 有可能奇异.因此，为保持正定性，φ 应取非负数值.由于正定矩阵与半正定矩阵之和仍为正定矩阵，因此当 $\varphi\geqslant 0$ 时，保持正定性是显然的.

拟牛顿法是无约束最优化方法中最有效的一类算法.它有许多优点，比如，迭代中仅需一阶导数，不必计算Hessian矩阵，当使 H_k 正定时，算法产生的方向均为下降方向，并且这类算法具有二次终止性，对于一般的情形，具有超线性收敛速率，而且还具有 n 步二级收敛速率.可见，拟牛顿算法集中了许多算法的长处.拟牛顿法的缺点是所需存贮量较大，对于大型问题，可能遇到存贮方面的困难.

3.10 无约束最优化的直接方法

前面所介绍的各种多维无约束极小化算法都有一个共同的特点，即要求目标函数 $f(x)$ 必须是可微的.但是，如果目标函数是不可微的甚至是不连续的或没有解析表达式，将无法按照前面所介绍的方法求解.这时，一般采用直接方法.

直接方法与使用导数的方法相比，一般来说，收敛得比较慢，但是，它对目标函数不要求导数存在，迭代比较简单，编制程序一般也比较容易，根据数值计算的经验，对于变量不多的问题，能够收到较好的效果.因此，这类算法是最优化方法中一个重要组成部分，也是有待进一步研究的重要方面.

下面分别介绍各种无约束优化的直接算法.

3.10.1 Hooke-Jeeves方法

Hooke-Jeeves方法是由Hooke和Jeeves于1961年提出的，是一种不使用导数的直接搜索算法.算法从初始基点开始，包括两种类型的移动，即探测移动和模式移动.探测移动依次沿 n 个坐标轴进行，用以确定新的基点和有利于函数值下降的方向.模式移动沿相邻两个基点连线方向进行，试图使函数值更快地减小.两种移动交替进行.

设目标函数为 $f(x)$，$x\in E^n$.坐标方向为

$$e_j=(0,\cdots,0,\underset{\substack{\uparrow\\ j}}{1},0,\cdots,0)^{\mathrm{T}},\quad j=1,\cdots,n.$$

给定初始步长 δ，加速因子 α.任取初始点 $x^{(1)}$，作为第1个基点.下面以 $x^{(j)}$ 表示第 j 个基点.在每轮探测移动中，自变量用 $y^{(j)}$ 表示，即 $y^{(j)}$ 是沿 e_j 探测的出发点.这样，$y^{(1)}$ 是沿 e_1 探测的出发点，$y^{(n+1)}$ 是沿 e_n 探测得到的点.

首先，从 $y^{(1)}=x^{(1)}$ 出发，进行探测移动.先沿 e_1 探测.如果 $f(y^{(1)}+\delta e_1)<f(y^{(1)})$，则探测成功，令

$$y^{(2)}=y^{(1)}+\delta e_1,\tag{3.10.1}$$

并从 $y^{(2)}$ 出发，沿 e_2 探测.

否则，沿 e_1 方向的探测失败，再沿 $-e_1$ 方向探测.如果 $f(y^{(1)}-\delta e_1)<f(y^{(1)})$，则沿 $-e_1$ 方向的探测成功，令

$$y^{(2)} = y^{(1)} - \delta e_1, \tag{3.10.2}$$

并从 $y^{(2)}$出发,沿 e_2 探测.

如果 $f(y^{(1)} - \delta e_1) \geqslant f(y^{(1)})$,则沿 $-e_1$ 方向的探测也失败.令

$$y^{(2)} = y^{(1)}, \tag{3.10.3}$$

再从 $y^{(2)}$出发,沿 e_2 方向探测,方法同上,得到的点记作 $y^{(3)}$.按此方式做下去,直至沿 n 个坐标方向探测完毕,得到点 $y^{(n+1)}$.

如果 $f(y^{(n+1)}) < f(x^{(1)})$,则 $y^{(n+1)}$作为新的基点.记作

$$x^{(2)} = y^{(n+1)}. \tag{3.10.4}$$

这时,$d = x^{(2)} - x^{(1)}$是有利于函数值减小的方向.

下一步,沿方向 $x^{(2)} - x^{(1)}$进行模式移动,令新的 $y^{(1)}$为

$$y^{(1)} = x^{(2)} + \alpha(x^{(2)} - x^{(1)}). \tag{3.10.5}$$

模式移动之后,以 $y^{(1)}$为起点进行探测移动,这轮探测仍然沿坐标轴方向进行.探测完毕,得到的点仍记作 $y^{(n+1)}$.

如果 $f(y^{(n+1)}) < f(x^{(2)})$,则表明此次模式移动成功,于是取新的基点 $x^{(3)} = y^{(n+1)}$,再沿方向 $x^{(3)} - x^{(2)}$进行模式移动.

如果 $f(y^{(n+1)}) \geqslant f(x^{(2)})$,则表明此次模式移动及此次模式移动之后的探测移动均无效.于是退回到基点 $x^{(2)}$,减小步长 δ,再从 $x^{(2)}$出发,依次沿各坐标轴方向进行探测移动.如此继续下去,直到满足精度要求,即步长 δ 小于事先给定的某个小的正数ε 为止.

模式搜索法计算步骤如下:

(1) 给定初始点 $x^{(1)} \in E^n$,n 个坐标方向$e_1, e_2, \cdots, e_n$,初始步长 δ,加速因子 $\alpha \geqslant 1$,缩减率 $\beta \in (0,1)$,允许误差 $\varepsilon > 0$,令 $y^{(1)} = x^{(1)}, k = 1, j = 1$.

(2) 若 $f(y^{(j)} + \delta e_j) < f(y^{(j)})$,令 $y^{(j+1)} = y^{(j)} + \delta e_j$,转(4);否则,转(3).

(3) 若 $f(y^{(j)} - \delta e_j) < f(y^{(j)})$,令 $y^{(j+1)} = y^{(j)} - \delta e_j$,转(4);若 $f(y^{(j)} - \delta e_j) \geqslant f(y^{(j)})$,令 $y^{(j+1)} = y^{(j)}$,转(4).

(4) 如果 $j < n$,令 $j = j + 1$,转(2);否则,转(5).

(5) 若 $f(y^{(n+1)}) < f(x^{(k)})$,转(6),否则,转(7).

(6) 令 $x^{(k+1)} = y^{(n+1)}$,再令 $y^{(1)} = x^{(k+1)} + \alpha(x^{(k+1)} - x^{(k)})$, $k = k + 1, j = 1$,转(2).

(7) 若 $\delta \leqslant \varepsilon$ 则计算结束,取 $\bar{x} = x^{(k)}$;否则令 $\delta = \beta\delta$, $y^{(1)} = x^{(k)}$, $x^{(k+1)} = x^{(k)}$,令 $k = k + 1$,再令 $j = 1$,返回(2).

例 3.15 用 Hooke-Jeeves 法求解下列问题:

$$\min \quad f(x) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1.$$

解 取 $x^{(1)} = (1,1)^T, e_1 = (1,0)^T, e_2 = (0,1)^T, \delta = 1, \alpha = 1, \beta = \frac{1}{2}$.

第一次迭代:

(1) 令 $y^{(1)} = x^{(1)} = (1,1)^T, k = j = 1$.

(2) 因为$f(y^{(1)}) = -3$,有

$$f(y^{(1)} + \delta e_1) = f(2,1) = -6,$$

$$f(y^{(1)} + \delta e_1) < f(y^{(1)}),$$

所以,$y^{(2)} = y^{(1)} + \delta e_1 = (2,1)^T$.

(3) 由于 $j=1<n=2$,因此转(2),进行计算:

$$f(y^{(2)}+\delta e_2)=f(2,2)=-4>-6=f(y^{(2)}),$$

$$f(y^{(2)}-\delta e_2)=f(2,0)=-4>-6.$$

所以
$$y^{(3)}=y^{(2)}=(2,1)^{\mathrm{T}}.$$

这时,$j=2=n$,且 $f(y^{(3)})=-6<f(x^{(1)})=f(1,1)=-3$.

(4) 令

$$x^{(2)}=y^{(3)}=(2,1)^{\mathrm{T}},$$

$$y^{(1)}=x^{(2)}+\alpha(x^{(2)}-x^{(1)})=(3,1)^{\mathrm{T}},$$

$$f(y^{(1)})=f(3,1)=-7.$$

第一次迭代完成,这时,$k=2$,再令 $j=1$,回到(2)再进行计算.

第二次迭代:

$$f(y^{(1)}+\delta e_1)=f(4,1)=-6>f(y^{(1)})=-7,$$

$$f(y^{(1)}-\delta e_1)=f(2,1)=-6>f(y^{(1)})=-7,$$

$$y^{(2)}=y^{(1)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}.$$

又因为 $j=1<2$,再返回(2).

$$f(y^{(2)}+\delta e_2)=f(3,2)=-7=f(y^{(2)}),$$

$$f(y^{(2)}-\delta e_2)=f(3,0)=-3>-7=f(y^{(2)}).$$

故
$$y^{(3)}=y^{(2)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}.$$

这时,$j=2=n$,且

$$f(y^{(3)})=f(3,1)=-7<f(x^{(2)})=-6,$$

于是令

$$x^{(3)}=y^{(3)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix},$$

从 $x^{(3)}$ 出发,沿方向 $x^{(3)}-x^{(2)}$ 进行模式移动.令

$$y^{(1)}=x^{(3)}+\alpha(x^{(3)}-x^{(2)})=2x^{(3)}-x^{(2)}=\begin{pmatrix}4\\1\end{pmatrix}.$$

这时 $k=3$,再令 $j=1$,回到(2)再进行计算.

第三次迭代:

$$f(y^{(1)}+\delta e_1)=f(5,1)=-3>f(y^{(1)})=-6,$$

$$f(y^{(1)}-\delta e_1)=f(3,1)=-7<f(y^{(1)}),$$

故
$$y^{(2)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}.$$

又因为 $j=1<2$,再返回(2),有

$$f(y^{(2)}+\delta e_2)=f(3,2)=-7=f(y^{(2)}),$$

$$f(y^{(2)}-\delta e_2)=f(3,0)=-3>-7=f(y^{(2)}).$$

故
$$y^{(3)}=y^{(2)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}.$$

这时，$j=2=n$，且

$$f(y^{(3)})=f(3,1)=f(x^{(3)}),$$

转到(7).

令 $\delta=\delta/2$，$y^{(1)}=x^{(3)}$，$x^{(4)}=x^{(3)}$，这时 $k=4$，再令 $j=1$，回到(2)进行计算.

第四次迭代：

$$f(y^{(1)}+\delta e_1)=f(3.5,1)=-6.75>f(y^{(1)})=-7,$$

$$f(y^{(1)}-\delta e_1)=f(2.5,1)=-6.75>f(y^{(1)}),$$

$$y^{(2)}=\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}.$$

又因为 $j=1<2$，返回(2)，由于

$$f(y^{(2)}+\delta e_2)=f(3,1.5)=-7.5<f(y^{(2)}),$$

故

$$y^{(3)}=\begin{pmatrix}3\\1.5\end{pmatrix}.$$

这时，$j=2=n$，且 $f(y^{(3)})=-7.5<f(x^{(4)})$，所以令

$$x^{(5)}=\begin{pmatrix}3\\1.5\end{pmatrix},\ y^{(1)}=x^{(5)}+\alpha(x^{(5)}-x^{(4)})=(3,2)^{\mathrm{T}}.$$

这时，$k=5$，$f(y^{(1)})=-7$，再令 $j=1$，回到(2)进行计算，直到求得近似最优解 $\bar{x}=(4,2)^{\mathrm{T}}$的解为止.

在上面的介绍中，探测移动沿各坐标方向所取步长相同.实际上，不同坐标方向可以给定不同的步长.实现这一点没什么困难，只要把涉及步长的表达式稍加修改即可.也有人对Hooke-Jeeves 方法作了修正，这里不再介绍.

模式移动的方向可以看作最速下降方向的近似，因此模式搜索也可以看作最速下降法的一种近似.由此可知，这种方法的收敛速度是比较慢的.但是，编制程序比较简单，对变量不多的问题可以使用，而且确是一种可靠的方法.

3.10.2 单纯形法

无约束极小化的单纯形法与线性规划的单纯形法不同，它是在 1962 年由 Spendley，Hext 和 Himsworth 首先提出的，1965 年由 Nelder 和 Mead 改进.单纯形法也是一种不使用导数的求解无约束极小化问题的直接搜索方法，与前面几种方法不同的是，单纯形替换法不是利用搜索方向从一个点迭代到另一个更优的点，而是从一个单纯形迭代到另一个更优的单纯形.下面先介绍一些基本概念.

定义 3.20 单纯形(simplex) n 维空间中恰好有 $n+1$ 个顶点(极点)的有界的凸多面体称为一个单纯形.

由定义 3.20 可知，一维空间中的单纯形是线段，二维空间中的单纯形是三角形，三维空间中的单纯形则是四面体.若单纯形的 $n+1$ 个顶点中任意两点间的距离相等，则称此单纯形为正规单纯形.

单纯形法的基本思想是给定 E^n 中的一个单纯形后，求出 $n+1$ 个顶点上的函数值，确定出有最大函数值的点(称为最高点)和最小函数值的点(称为最低点).然后通过反射、扩展、压缩等方法求出一个较好点，用它取代最高点，构成新的单纯形，或者通过向最低点收缩形成新的单纯形，用这样的方法逼近最小点.

下面，以极小化二元函数 $f(x_1, x_2)$ 为例，说明如何实现单纯形的转换.

首先，在平面上取不共线的三点 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$ 和 $x^{(3)}$，构成初始单纯形(见图 3.9).

设最高点为 $x^{(3)}$，最低点为 $x^{(1)}$，即

$$f(x^{(1)}) < f(x^{(2)}) < f(x^{(3)}). \tag{3.10.6}$$

现在进行反射步骤. 运用单纯形法时，总是将最高点经过其余点的形心进行反射. 对于本问题，就是将 $x^{(3)}$ 经过线段 $x^{(1)}x^{(2)}$ 的中点

$$\bar{x} = \frac{1}{2}(x^{(1)} + x^{(2)}) \tag{3.10.7}$$

进行反射. 得到反射点

$$x^{(4)} = \bar{x} + \alpha(\bar{x} - x^{(3)}). \tag{3.10.8}$$

正数 α 称为反射系数，一般取 $\alpha = 1$.

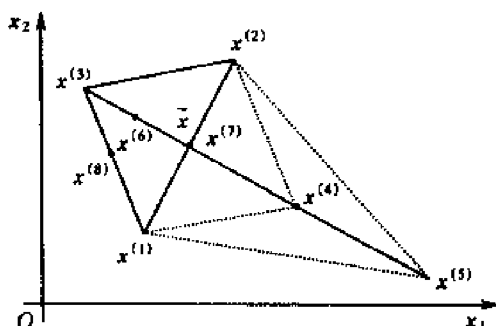


图 3.9

反射后有三种可能的情形：

(1) 如果 $f(x^{(4)}) < f(x^{(1)})$，则表明方向

$$d = x^{(4)} - \bar{x}$$

对于函数值的减小是有利的，于是沿此方向进行扩展. 令

$$x^{(5)} = \bar{x} + \gamma(x^{(4)} - \bar{x}). \tag{3.10.9}$$

其中，$\gamma > 1$ 称为扩展系数. 若

$$f(x^{(5)}) < f(x^{(4)}),$$

则用 $x^{(5)}$ 取代 $x^{(3)}$，得到以 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$ 和 $x^{(5)}$ 为顶点的新的单纯形.

若 $f(x^{(5)}) \geq f(x^{(4)})$，则扩展失败. 这时，用 $x^{(4)}$ 替换 $x^{(3)}$，得到以 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$ 和 $x^{(3)}$ 为顶点的新的单纯形.

(2) 如果 $f(x^{(1)}) \leq f(x^{(4)}) \leq f(x^{(2)})$，即 $f(x^{(4)})$ 不小于最低点处的函数值，不大于次高点处的函数值，则用 $x^{(4)}$ 替换 $x^{(3)}$，得到以 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$ 和 $x^{(4)}$ 为顶点的新的单纯形.

(3) 如果 $f(x^{(4)}) > f(x^{(2)})$，即 $f(x^{(4)})$ 大于次高点处的函数值，则进行压缩步骤. 为此，在 $x^{(4)}$ 和 $x^{(3)}$ 中选择函数值最小的点. 令

$$f(x') = \min\{f(x^{(3)}), f(x^{(4)})\}.$$

其中，$x' \in \{x^{(3)}, x^{(4)}\}$，令

$$x^{(6)} = \bar{x} + \beta(x' - \bar{x}). \tag{3.10.10}$$

其中，$\beta \in (0,1)$ 为压缩系数. 这样，$x^{(6)}$ 位于 $\bar{x}$ 与 x' 之间.

若 $f(x^{(6)}) \leq f(x')$，则用 $x^{(6)}$ 取代 $x^{(3)}$，得到以 $x^{(1)}$，$x^{(2)}$ 和 $x^{(6)}$ 为顶点的新的单纯形.

若 $f(x^{(6)}) > f(x')$，则进行收缩. 最低点 $x^{(1)}$ 不动，其余两点 $x^{(2)}$ 和 $x^{(3)}$ 均向 $x^{(1)}$ 移近一半距离. 令

$$x^{(7)} = x^{(2)} + \frac{1}{2}(x^{(1)} - x^{(2)}), \tag{3.10.11}$$

$$x^{(8)} = x^{(3)} + \frac{1}{2}(x^{(1)} - x^{(3)}), \tag{3.10.12}$$

得到以 $x^{(1)}$，$x^{(7)}$ 和 $x^{(8)}$ 为顶点的新单纯形.

以上几种情形，不论属于哪一种，所得到的新的单纯形，必有一个顶点的函数值小于或等于原单纯形各顶点上的函数值. 每得到一个新的单纯形后，再重复以上步骤，直至满足收敛准则为止.

单纯形计算步骤如下.

(1) 给定初始单纯形,其顶点为

$$x^{(i)}\in E^n,\quad i=1,2,\cdots,n+1.$$

反射系数 $\alpha>0$,扩展系数 $\gamma>1$,压缩系数 $\beta\in(0,1)$,允许误差 $\varepsilon>0$.计算函数值

$$f(x^{(i)}),\quad i=1,2,\cdots,n+1.$$

令 $k=1$.

(2) 确定最高点 $x^{(h)}$,次高点 $x^{(g)}$,最低点 $x^{(l)}$,$h,g,l\in\{1,2,\cdots,n+1\}$,使得

$$f(x^{(h)})=\max\{f(x^{(1)}),f(x^{(2)}),\cdots,f(x^{(n+1)})\},$$
$$f(x^{(g)})=\max\{f(x^{(i)})\mid x^{(i)}\neq x^{(h)}\},$$
$$f(x^{(l)})=\min\{f(x^{(1)}),f(x^{(2)}),\cdots,f(x^{(n+1)})\}.$$

计算除 $x^{(h)}$外的 n 个点的形心$\bar{x}$,令

$$\bar{x}=\frac{1}{n}\Big(\sum_{i=1}^{n+1}x^{(i)}-x^{(h)}\Big),$$

计算出 $f(\bar{x})$.

(3) 进行反射,令

$$x^{(n+2)}=\bar{x}+\alpha(\bar{x}-x^{(h)}),$$

计算 $f(x^{(n+2)})$.

(4) 若 $f(x^{(n+2)})<f(x^{(l)})$,则进行扩展,令

$$x^{(n+3)}=\bar{x}+\gamma(x^{(n+2)}-\bar{x}),$$

计算 $f(x^{(n+3)})$,转(5);若

$$f(x^{(l)})\leqslant f(x^{(n+2)})\leqslant f(x^{(g)}).$$

则令 $x^{(h)}=x^{(n+2)}$, $f(x^{(h)})=f(x^{(n+2)})$,转(7);

若 $f(x^{(n+2)})>f(x^{(g)})$,则进行压缩,令

$$f(x^{(h')})=\min\{f(x^{(h)}),f(x^{(n+2)})\}.$$

其中,$h'\in\{h,n+2\}$,令

$$x^{(n+4)}=\bar{x}+\beta(x^{(h')}-\bar{x}),$$

计算 $f(x^{(n+4)})$,转(6).

(5) 若 $f(x^{(n+3)})<f(x^{(n+2)})$,则令

$$x^{(h)}=x^{(n+3)},\ f(x^{(h)})=f(x^{(n+3)}),$$

转(7);否则,令

$$x^{(h)}=x^{(n+2)},\ f(x^{(h)})=f(x^{(n+2)}),$$

转(7).

(6) 若 $f(x^{(n+4)})\leqslant f(x^{(h')})$,则令

$$x^{(h)}=x^{(n+4)},\ f(x^{(h)})=f(x^{(n+4)}),$$

转(7);否则,进行收缩,令

$$x^{(i)}=x^{(i)}+\frac{1}{2}(x^{(l)}-x^{(i)}),\quad i=1,2,\cdots,n+1.$$

计算 $f(x^{(i)})$, $i=1,2,\cdots,n+1$,转(7).

(7) 检验是否满足收敛准则,若

$$\Big\{\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}[f(x^{(i)})-f(\bar{x})]^2\Big\}^{\frac{1}{2}}<\varepsilon,$$

则停止计算,现行最好点可作为极小点的近似;否则,令 $k=k+1$,返回(2).

例 3.16 用单纯形法求解下列问题

$$\min f(x)=(x_1-3)^2+2(x_2+2)^2,$$

取初始单纯形的顶点为

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},x^{(2)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},x^{(3)}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

$$\alpha=1,\gamma=2,\beta=\frac{1}{2},\varepsilon=2.$$

第一次迭代:

各顶点处的函数值为

$$f(x^{(1)})=17,f(x^{(2)})=12,f(x^{(3)})=27,$$

显然有 $$x^{(h)}=x^{(3)},x^{(g)}=x^{(1)},x^{(l)}=x^{(2)},$$

取 $$h=3,g=1,l=2.$$

将 $x^{(3)}$经 $x^{(1)}$和 $x^{(2)}$的形心进行反射,令

$$\begin{aligned}\bar{x}&=\frac{1}{2}(x^{(1)}+x^{(2)})\\&=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{pmatrix},\end{aligned}$$

在 $\bar{x}$ 处函数值$f(\bar{x})=\frac{57}{4}$.令

$$\begin{aligned}x^{(4)}&=\bar{x}+\alpha(\bar{x}-x^{(3)})=2\bar{x}-x^{(3)}\\&=2\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\end{aligned}$$

有 $f(x^{(4)})=6$,由于 $f(x^{(4)})<f(x^{(l)})$,进行扩展,令

$$\begin{aligned}x^{(5)}&=\bar{x}+\gamma(x^{(4)}-\bar{x})=2x^{(4)}-\bar{x}\\&=2\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix},\end{aligned}$$

有 $f(x^{(5)})=\frac{9}{4}$,由于 $f(x^{(5)})<f(x^{(4)})$,因此用 $x^{(5)}$替换 $x^{(3)}$,得到新的单纯形.把 $x^{(5)}$仍记作 $x^{(3)}$,则新单纯形顶点为

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},x^{(2)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},x^{(3)}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix},\tag{3.10.13}$$

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}[f(x^{(i)})-f(\bar{x})]^2\right\}^{\frac{1}{2}}\\&=\left\{\frac{1}{3}\left[\left(17-\frac{57}{4}\right)^2+\left(12-\frac{57}{4}\right)^2+\left(\frac{9}{4}-\frac{57}{4}\right)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}\\&=\left\{\frac{1}{3}\left[\left(\frac{11}{4}\right)^2+\left(\frac{9}{4}\right)^2+12^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}\\&=7.23>\varepsilon.\end{aligned}$$

第二次迭代:

单纯形的顶点由(3.10.13)给定.显然有

$$x^{(h)}=x^{(1)},x^{(g)}=x^{(2)},x^{(l)}=x^{(3)},$$

则
$$f(x^{(1)})=17,f(x^{(2)})=12,f(x^{(3)})=\frac{9}{4}.$$

进行反射,求 $x^{(1)}$关于 $x^{(2)}$和 $x^{(3)}$的形心的反射点.令

$$\bar{x}=\frac{1}{2}(x^{(2)}+x^{(3)})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{4}\\-1\end{pmatrix},$$

有 $f(\bar{x})=\frac{81}{16}$,反射点为

$$x^{(4)}=\bar{x}+\alpha(\bar{x}-x^{(h)})=2\bar{x}-x^{(1)}=2\begin{pmatrix}\frac{5}{4}\\-1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-2\end{pmatrix},$$

有 $f(x^{(4)})=\frac{1}{4}$.由于 $f(x^{(4)})<f(x^{(l)})$,因此进行扩展,令

$$x^{(5)}=\bar{x}+\gamma(x^{(4)}-\bar{x})=2x^{(4)}-\bar{x}=2\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\frac{5}{4}\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{4}\\-3\end{pmatrix},$$

有 $f(x^{(5)})=\frac{41}{16}$.由于 $f(x^{(5)})>f(x^{(4)})$,因此用 $x^{(4)}$替换 $x^{(1)}$.令 $x^{(1)}=x^{(4)}$,得到新的单纯形,其顶点为

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-2\end{pmatrix},x^{(2)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},x^{(3)}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix}\tag{3.10.14}$$

$f(x^{(1)})=\frac{1}{4}$,$f(x^{(2)})$和 $f(x^{(3)})$同上.

$$\left\{\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}[f(x^{(i)})-f(\bar{x})]^2\right\}^{\frac{1}{2}}=\left\{\frac{1}{3}\left[\left(\frac{1}{4}-\frac{81}{16}\right)^2+\left(12-\frac{81}{16}\right)^2+\left(\frac{9}{4}-\frac{81}{16}\right)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}$$
$$=5.14>\varepsilon$$

第三次迭代:

单纯形顶点由(3.10.14)给定.已知

$$f(x^{(1)})=\frac{1}{4},f(x^{(2)})=12,f(x^{(3)})=\frac{9}{4},$$

且
$$x^{(h)}=x^{(2)},x^{(g)}=x^{(3)},x^{(l)}=x^{(1)}.$$

求 $x^{(2)}$关于 $x^{(1)}$和 $x^{(3)}$的形心反射点.令

$$\bar{x}=\frac{1}{2}(x^{(1)}+x^{(3)})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-2\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\-2\end{pmatrix},$$

有 $f(\bar{x})=1$.反射点

$$x^{(4)}=\bar{x}+\alpha(\bar{x}-x^{(2)})=2\bar{x}-x^{(2)}=2\begin{pmatrix}2\\-2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\-4\end{pmatrix},$$

有 $f(x^{(4)})=8$.由于 $f(x^{(4)})>f(x^{(3)})$,因此进行压缩.由于

$$f(x^{(4)})=\min\{f(x^{(h)}),f(x^{(4)})\}.$$

因此令
$$x^{(6)}=\bar{x}+\beta(x^{(4)}-\bar{x})=\frac{1}{2}\bar{x}+\frac{1}{2}x^{(4)}$$
$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2\\-2\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}3\\-4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-3\end{pmatrix},$$

有 $f(x^{(6)})=\frac{9}{4}$. 由于 $f(x^{(6)})<f(x^{(4)})$, 因此用 $x^{(6)}$ 替换 $x^{(2)}$, 令 $x^{(2)}=x^{(6)}$, 得到新的单纯形, 其顶点是

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-2\end{pmatrix},x^{(2)}=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-3\end{pmatrix},x^{(3)}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2}\\-2\end{pmatrix},$$

有
$$f(x^{(1)})=\frac{1}{4},f(x^{(2)})=\frac{9}{4},f(x^{(3)})=\frac{9}{4},$$

则 $\left\{\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}[f(x^{(i)})-f(\bar{x})]^{2}\right\}^{\frac{1}{2}}=\left\{\frac{1}{3}\left[\left(\frac{1}{4}-1\right)^2+\left(\frac{9}{4}-1\right)^2+\left(\frac{9}{4}-1\right)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}=1.11<\varepsilon.$

已满足精度要求, 得近似解 $x^{(1)}=\left(\frac{5}{4},-2\right)^{\mathrm{T}}$. 实际上, 问题的极小点 $\bar{x}=(3,-2)^{\mathrm{T}}$.

上述的单纯形法不是最初形式, 而是经过改进的. 最初的方法称为正规单纯形法, 每次迭代所用单纯形均为正规单纯形, 一般认为改进的单纯形法优于正规单纯形法. 因此, 不再介绍正规单纯形法.

3.11 惩罚函数法和障碍函数法

惩罚函数法(penalty function method)和障碍函数法(barrier function method)都是通过将约束极小化问题转化成无约束极小化问题来求解.

惩罚函数法又称外点法, 障碍函数法又称内点法, 它们的基本原理都是在原目标函数中加上一个惩罚函数. 把约束问题转化为无约束问题, 进而用无约束最优化方法来求解. 惩罚函数的功能是对非可行点或企图穿越边界而逃离可行域的点赋予一个极大的函数值. 这样, 在对新的目标函数进行无约束极小化的过程中, 如果迭代点在可行域外, 就会迫使迭代点逐步逼近可行域; 如果迭代点在可行域内, 迭代点不会离开可行域. 这样, 所得的新的目标函数的无约束极小化的解就会逼近于原目标函数的约束极小化的解.

3.11.1 惩罚函数法

设原问题为

$$\left.\begin{aligned}&\min\quad f(x),\\&\text{s.t.}\quad g_i(x)\leqslant 0,\quad i=1,2,\cdots,m,\\&\qquad\ h_j(x)=0,j=1,2,\cdots,l.\end{aligned}\right\}\tag{3.11.1}$$

则可构造出无约束极小化问题:

$$\min\quad F(x,\mu)=f(x)+\mu\alpha(x).\tag{3.11.2}$$

其中, $\alpha(x)=\sum_{i=1}^{m}[\max(0,g_i(x))]^2+\sum_{j=1}^{l}[h_j(x)]^2$, μ 是一个充分大的正数, 称为惩罚因

子.

通常把 $\mu\alpha(x)$ 称为罚函数，记为 $P(x,\mu)=\mu\alpha(x)$；而把新目标函数 $F(x,\mu)=f(x)+P(x,\mu)$ 称为增广目标函数.

当 x 是原问题可行点时，$\alpha(x)=0$，从而有 $f(x)=F(x,\mu)$. 当 x 不是原问题可行点时，在 x 处，$\mu\alpha(x)$ 是很大的正数，它的存在是对点脱离可行域的一种惩罚，其作用是在极小化过程中迫使迭代点靠近可行域. 因此，求解新问题能够得到约束问题的近似解，而且 μ 越大，$F(x,\mu)$ 的无约束极小点就越接近于 $f(x)$ 的约束极小点.

下面的定理 3.40 揭示了约束极小化问题(3.11.1)与无约束极小化问题(3.11.2)的极小点之间的关系.

定理 3.40 设对给定的参数 μ，$F(x,\mu)$ 的无约束极小点为 x_μ. 那么，x_μ 成为 $f(x)$ 的约束极小点的充要条件为 x_μ 是原问题的可行点.

证明 必要性显然成立，下面证明充分性. 设原问题的可行域为 D，$x_\mu\in D$，则由 $\alpha(x)$ 的构造可知

$$\alpha(x_\mu)=0,\ x_\mu\in D.$$

由于已知 x_μ 是 $F(x,\mu)$ 的无约束极小点，故存在 x_μ 的一个邻域 $N(x,\varepsilon)$，使

$$F(x_\mu,\mu)\leqslant F(x,\mu),\quad x\in N(x_\mu,\varepsilon).$$

现任取 $x\in D\cap N(x_\mu,\varepsilon)$，则有

$$\alpha(x)=0,\quad x\in D\cap N(x_\mu,\varepsilon).$$

所以

$$F(x_\mu,\mu)=f(x_\mu)+\mu\alpha(x_\mu)=f(x_\mu),$$
$$F(x,\mu)=f(x)+\mu\alpha(x)=f(x).$$

因此

$$f(x_\mu)\leqslant f(x),\text{当 } x\in D\cap N(x_\mu,\varepsilon)$$

表明，x_μ 是原问题的约束极小点.

实际计算中，惩罚因子 μ 的选择十分重要. 如果 μ 过大，则给惩罚函数的极小化增加了计算上的困难；如果 μ 太小，则惩罚函数的极小点远离约束问题的最优解，计算效率很差. 因此，一般策略是取一个趋向无穷大的严格递增正数列 $\{\mu_k\}$，从某个 μ_1 开始，对每个 k，求解

$$\min\quad f(x)+\mu_k\alpha(x),$$

从而得到一个极小点的序列，在适当的条件下，这个序列将收敛于约束问题的最优解. 如此通过求解一系列无约束问题来获得约束问题最优解的方法称为序列无约束极小化方法，简称 SUMT 方法.

可以知道，x_μ 是原问题的可行点等价于 $\mu\alpha(x_\mu)=0$. 但是，往往只有当 $\mu\to+\infty$ 时，才有 $\mu\alpha(x_\mu)=0$，为使计算能在适当的时候终止，可根据要求事先确定一个小正数 ε，当满足

$$0<\mu\alpha(x_\mu)\leqslant\varepsilon$$

时，即可终止计算，这时，x_μ 与原问题的精确极小点的误差已经可以接受.

惩罚函数法算法过程是：

(1) 取初始点 $x^{(0)}$ 为非可行点，$\mu_1>0$(通常取 $\mu_1=1$)，$\varepsilon>0$，$c>1$(通常取 $c=10$)，$k=1$.

(2) 以 $x^{(k-1)}$ 为初始点，求解无约束极小化问题：

$$\min F(x,\mu_k)=f(x)+\mu_k\alpha(x).$$

设无约束极小点为 $x^{(k)}$.

(3) 若 $\mu_k\alpha(x^{(k)})\leqslant\varepsilon$,则停止计算,输出 $x^{(k)}$;否则,令 $\mu_{k+1}=c\mu_k, k=k+1$,转(2).

例 3.17 用惩罚函数法(外点法)求解

$$\min \quad f(x)=x_1^2+2x_2^2+2x_1,$$
$$\text{s.t.} \quad x_1+x_2-1=0.$$

要求以 $x^{(0)}=(1,1)$为初始点,$c=10$,迭代 3 次.

解
$$F(x,\mu_k)=x_1^2+2x_2^2+2x_1+\mu_k(x_1+x_2-1)^2,$$
$$x^{(0)}=(1,1),$$
$$k=1,\mu_1=1,F(x,\mu_1)=x_1^2+2x_2^2+2x_1+(x_1+x_2-1)^2.$$

任选一种无约束极小化算法,可解得 $F(x,\mu_1)$的无约束极小点为

$$x^{(1)}=(-0.2,0.4),F(x^{(1)},\mu_1)=0.32,$$
$$k=2,\mu_2=10,F(x,\mu_2)=x_1^2+2x_2^2+2x_1+10(x_1+x_2-1)^2.$$

以 $x^{(1)}$为初始点,可求得 $F(x,\mu_2)$的极小点为

$$x^{(2)}=(0.32,0.625),F(x^{(2)},\mu_2)=1.5237,$$
$$k=3,\mu_3=100,F(x,\mu_3)=x_1^2+2x_2^2+2x_1+100(x_1+x_2-1)^2.$$

以 $x^{(2)}$为初始点,可求得 $F(x,\mu_3)$的极小点为

$$x^{(3)}=(0.325,0.662),F(x^{(3)},\mu_3)=1.537,$$
$$k=4,\mu_4=1000,F(x,\mu_4)=x_1^2+2x_2^2+2x_1+1000(x_1+x_2-1)^2.$$

以 $x^{(3)}$为初始点,可求得 $F(x,\mu_4)$的极小点为

$$x^{(4)}=(0.3324,0.6662),F(x^{(4)},\mu_3)=1.663.$$

而原问题的精确极小点与极小值为

$$\bar{x}=\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right),f(\bar{x})=\frac{15}{9}\approx1.6666.$$

$x^{(4)}$已很接近 $\bar{x}$.同时可以看出,$F(x^{(k+1)},\mu_k)$单调上升,并趋于 $f(\bar{x})$.

3.11.2 障碍函数法

障碍函数法又称内点法,在迭代过程中总是从内点出发,并保持在可行域内部进行搜索.因此,这种方法适用于只有不等式约束的问题.

设有纯不等式约束问题

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x),\\&\text{s.t.} \quad g_i(x)\leqslant0, \quad i=1,2,\cdots,m.\end{aligned} \tag{3.11.3}$$

设原问题内部非空,初始点 $x^{(0)}$选为内点.障碍函数法(内点法)构造的增广目标函数为

$$F(x,\gamma)=f(x)+\gamma B(x). \tag{3.11.4}$$

其中,$\gamma>0$,$B(x)>0$(当 x 为内点),且当 x 在边界时,$B(x)$的值为无穷大.这样,可阻止 $F(x,\gamma)$的极小点穿越边界,因而必定被限制为可行点.

障碍函数 $B(x)$有两种常见的构造方法:

$$B(x)=-\sum_{i=1}^{m}[g_i(x)]^{-1} \tag{3.11.5}$$

或

$$B(x)=-\sum_{i=1}^{m}\ln[-g_i(x)]. \tag{3.11.6}$$

障碍函数 $B(x)$的这两种构造方法各有优缺点.相对而言,(3.11.5)结构较简单,但其

导数(如果可导的话)复杂,更适用于不利用导数的无约束极小化算法;(3.11.6)虽然较复杂,但其导函数却较简单,因而更适用于利用导数的无约束极小化算法.

根据障碍函数 $B(x)$的定义,显然,γ 取值越小,(3.11.4)的最优解越接近(3.11.3)的最优解.但是,这里存在与外点法类似的问题,如果 γ 太小,则将给(3.11.4)的计算带来很大困难.因此,仍采取序列无约束极小化方法(SUMT),取一个严格单调递减且趋于零的障碍因子数列$\{\gamma_k\}$,对每一个 k,从内部出发,求解增广目标函数的极小点.

障碍函数法(内点法)算法过程:

(1) 取 $x^{(0)}$为内点,$\gamma_1>0$(通常取 $\gamma_1=1$),障碍因子缩小系数为 d,$0<d<1$,$k=1$,$\varepsilon>0$.

(2) 构造增广目标函数 $F(x,\gamma_k)=f(x)+\gamma_k B(x)$.

(3) 以 $x^{(k-1)}$为初始点,求解无约束优化问题

$$\min F(x,\gamma_k),$$

设其无约束极小点为 $x^{(k)}$.

(4) 如果 $\gamma_k B(x^{(k)})<\varepsilon$,则停止计算,输出点 $x^{(k)}$;否则,令 $\gamma_{k+1}=d\gamma_k$,$k=k+1$,转(2).

注:从理论上讲,$x^{(k)}$一定是可行域的内点,但是在实际计算过程中,由于步长是取离散数值,以及舍入误差等原因,使 $x^{(k)}$ 有可能取为非可行点.在这种情况下,应选用优于 $x^{(k+1)}$的内点来取代 $x^{(k)}$.

3.11.3 混合惩罚函数法

外点法(惩罚函数法)和内点法(障碍函数法)各有其优缺点:外点法适用面宽,既可处理不等式约束,又可处理等式约束,但所得的近似极小点的可行性差,一般都是外点,连不等式约束也不能满足;内点法的适用面窄,仅能处理不等式约束,但所得的近似极小点的可行性很好,是内点,能满足所有不等式约束.因此,往往将内点法和外点法结合起来使用,称之为混合惩罚函数法.当给定初始点 $x^{(0)}$后,对 $x^{(0)}$满足的那些不等式约束,按内点法来构造障碍函数 $B(x)$,对 $x^{(0)}$不满足的那些不等式约束和等式约束,按外点法构造惩罚函数 $P(x)$.同时,在算法程序中,为加快迭代,减少计算量,将利用极小点的已知近似值通过外推的途径来提高计算效率.

在混合惩罚函数法中,增广目标函数 $F(x,\gamma_k)$的构造为

$$F(x,\gamma_k)=f(x)+\gamma_k^{-1}P(x)+\gamma_k B(x). \tag{3.11.7}$$

其中,γ_k 满足,$\gamma_1>\gamma_2>\cdots>0$,且

$$P(x)=\sum_{j=1}^{l}[h_j(x)]^2,$$

$$B(x)=\sum_{i=1}^{m}[-g_j(x)]^{-1},$$

或

$$B(x)=-\sum_{i=1}^{m}\ln[-g_i(x)]^{-1}.$$

混合惩罚函数法的终止准则为$|\gamma_k^{-1}P(x^{(k)})|\leqslant\varepsilon$ 或$|\gamma_k B(x^{(k)})|\leqslant\varepsilon$,或将两者联合使用.

混合惩罚函数法的基本算法步骤如下.

(1) 取初始点 $x^{(0)}$,使满足 $h_j(x^{(0)})\neq 0$,$g_i(x^{(0)})<0$,$\gamma_1=1$,$c>1$(通常取 $c=4$ 或 $c=10$),$\varepsilon>0$,令 $k=1$.

(2) 构造 $F(x,\gamma_k)=f(x)+\gamma_k^{-1}P(x)+\gamma_k B(x)$,

以 $x^{(k-1)}$ 为初始点,求解无约束极小化问题

$$\min \quad F(x, \gamma_k).$$

设无约束极小点为 $x^{(k)}$.

(3) 极小点外推:记

$$\bar{x} = \frac{c^{\frac{1}{2}} x^{(k)} - x^{(k-1)}}{c^{\frac{1}{2}} - 1} \tag{3.11.8}$$

或

$$\bar{x} = \frac{x^{(k-2)} - (c + c^{\frac{1}{2}}) x^{(k-1)} + c^{\frac{3}{2}} x^{(k)}}{(c-1)(c^{\frac{1}{2}} - 1)}. \tag{3.11.9}$$

若有 $g_i(\bar{x})<0, i=1,2,\cdots,m,$,令 $x^{(k)}=\bar{x}$;否则,舍弃 $\bar{x}$.

(4) 若点 $x^{(k)}$ 满足终止准则,输出 $x^{(k)}$,计算停止;否则,令 $\gamma_k=\gamma_k/c, k=k+1$,转(2).

在以上算法中,(3.11.8)为极小点的一阶估计,(3.11.9)为二阶估计,当已有多个迭代点 $x^{(k)}$ 之后,采用(3.11.9)的效果较好.

3.12 可行方向法

可行方向法(feasible direction method)是一大类算法,最早的一个可行方向法是 1960 年由 G. Zoutendijk 提出的.现在,可行方向法已经发展成为求解约束问题的一类重要算法.它的基本原理非常直观.

在给定一个可行点 $x^{(k)}$ 之后,用某种方法确定一个改进的可行方向 $d^{(k)}$,求解一个有约束的一维搜索问题,得到最优步长 t_k,令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_k d^{(k)}$,如果 $x^{(k+1)}$ 仍不是最优解,则重复上述步骤.这样,可得到点列 $\{x^{(k)}\}$.在适当的条件下,能逼近于 $\bar{x}$.

各种不同的可行方向法的区别主要是构造下降可行方向 $d^{(k)}$ 的方法的不同.另外,每种具体的可行方向法在处理不同约束类型的问题时,其有效性也有较大区别.下面,将针对问题的约束条件的类型介绍相应的较为有效的算法.

根据选择可行方向的策略不同,大体上可将可行方向法分为三类:

(1) 通过求解一个线性规划问题来确定可行方向,如 Zoutendijk 方法、Frank-Wolfe 方法,Topis-Veinott 方法等;

(2) 利用投影矩阵,直接构造一个改进的可行方向,如 Rosen 的梯度投影法和 Rosen-Polak 方法等;

(3) 利用既约梯度,直接构造一个改进的可行方向,如 Wolfe 的既约梯度法及各种改进、凸单纯形法.

下面分别介绍各种可行方向法,首先介绍 Zoutendijk 可行方向法.

3.12.1 线性约束情形

考虑非线性规划问题

$$\left.\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leqslant b, \\ & Ex = e. \end{aligned}\right\} \tag{3.12.1}$$

其中，$f(x)$为可微函数，A 为 $m\times n$ 矩阵，E 为 $l\times n$ 矩阵，$x\in E^n$，b 和 e 分别为 m 和 l 维列向量.

首先讨论怎样选择下降可行方向.

定理 3.41 设 $\hat{x}$ 是问题(3.12.1)的可行解，在点 $\hat{x}$ 处有 $A_1\hat{x}=b_1$，$A_2\hat{x}<b_2$，其中

$$A=\begin{pmatrix}A_1\\A_2\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix},$$

则非零向量 d 为 $\hat{x}$ 处的可行方向的充要条件是 $A_1d\leqslant 0$, $Ed=0$.

证明 必要性 设非零向量 d 是 $\hat{x}$ 处的可行方向. 根据可行方向的定义，存在数 $\delta>0$，使得对每个 $t\in(0,\delta)$，有 $\hat{x}+td$ 为可行点，即

$$A(\hat{x}+td)\leqslant b, \tag{3.12.2}$$

$$E(\hat{x}+td)=e. \tag{3.12.3}$$

由于

$$A(\hat{x}+td)=\begin{pmatrix}A_1\\A_2\end{pmatrix}(\hat{x}+td)=\begin{pmatrix}b_1+tA_1d\\A_2\hat{x}+tA_2d\end{pmatrix},$$

因此(3.12.2)即

$$\begin{pmatrix}b_1+tA_1d\\A_2\hat{x}+tA_2d\end{pmatrix}\leqslant\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix}. \tag{3.12.4}$$

由于 $t>0$，由(3.12.4)可得 $A_1d\leqslant 0$. 又由(3.12.3)得到 $Ed=0$.

充分性 设

$$A_1d\leqslant 0,\ Ed=0. \tag{3.12.5}$$

由于 $A_2\hat{x}<b_2$，则存在正数 δ，使得对于所有的 $t\in(0,\delta)$，成立

$$A_2(\hat{x}+td)\leqslant b_2, \tag{3.12.6}$$

根据假设(3.12.5)及 $A_1\hat{x}=b_1$ 得

$$A_1(\hat{x}+td)\leqslant b_1. \tag{3.12.7}$$

(3.12.6)和(3.12.7)即

$$A(\hat{x}+td)\leqslant b, \tag{3.12.8}$$

又由 $Ed=0$ 及 $E\hat{x}=e$ 可知

$$E(\hat{x}+td)=e. \tag{3.12.9}$$

(3.12.8)和(3.12.9)表明 $\hat{x}+td$ 是可行点，因此 d 是 $\hat{x}$ 处的可行方向.

推论 在定理 3.41 的条件下，若非零向量 d 同时满足：

$$A_1d\leqslant 0,\ Ed=0,\ \nabla f(\hat{x})^{\mathrm{T}}d<0,$$

则 d 是 $\hat{x}$ 处的下降可行方向.

根据此推论，Zoutendijk 法把确定搜索方向归结为求解线性规划问题：

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & \nabla f(x)^{\mathrm{T}}d,\\ \text{s.t.}\quad & A_1d\leqslant 0,\\ & Ed=0,\\ & |d_j|\leqslant 1,\quad j=1,\cdots,n.\end{aligned}\right\} \tag{3.12.10}$$

其中，增加约束条件 $|d_j|\leqslant 1$，是为了获得一个有限解.

在(3.12.10)中，显然 $d=0$ 是可行解. 由此即知，目标函数的最优值必定小于或等于 0.

如果目标函数$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d$ 的最优值小于零,则得到下降可行方向 d;否则,即$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d$ 的最优值为零,则如下面定理所证,x 是 K-T 点.

定理 3.42 考虑问题(3.12.1),设 x 是可行解,在点 x 处有 $A_1x=b_1$ 和 $A_2x<b_2$,其中

$$A=\begin{pmatrix}A_1\\A_2\end{pmatrix},\ b=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix},$$

则 x 为 K-T 点的充要条件是$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d=0$.

证明 根据定义,x 为 K-T 点的充要条件是存在向量 $u\geqslant 0$和 v,使得

$$\nabla f(x)+A_1^{\mathrm{T}}u+E^{\mathrm{T}}v=0. \tag{3.12.11}$$

令 $v=p-q$, $p,q\geqslant 0$. 把(3.12.11)写成

$$(A_1^{\mathrm{T}},E^{\mathrm{T}},-E^{\mathrm{T}})\begin{pmatrix}u\\p\\q\end{pmatrix}=-\nabla f(x), \tag{3.12.12}$$

$$\begin{pmatrix}u\\p\\q\end{pmatrix}\geqslant 0.$$

根据 Farkars 定理,(3.12.12)有解的充要条件

$$\begin{pmatrix}A_1\\E\\-E\end{pmatrix}d\leqslant 0,\ -\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d>0 \tag{3.12.13}$$

无解,即

$$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d<0,\quad A_1d\leqslant 0,\ Ed=0\text{无解}.$$

所以 x 为 K-T 点的充要条件是问题(3.12.10)的目标函数的最优值等于零.

根据上述定理,求解问题(3.12.10)的结果或者是得到下降可行方向,或者是得到 K-T 点.

其次,分析怎样确定一维搜索的步长.

设 $x^{(k)}$是(3.12.1)的可行解,不妨看作第 k 次迭代的出发点. $d^{(k)}$为 $x^{(k)}$处的一个下降可行方向. 后继点 $x^{(k+1)}$由(3.12.14)给出

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}. \tag{3.12.14}$$

现在要解决的问题是怎样确定 t_k. t_k 的取值原则有两条:第一,保持迭代点 $x^{(k)}+t_kd^{(k)}$的可行性;第二,使目标函数值尽可能小.

根据上述原则,可以通过求解下列一维搜索问题来确定步长 t_k,有

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & f(x^{(k)}+td^{(k)}),\\ \text{s.t.}\quad & A(x^{(k)}+td^{(k)})\leqslant b,\\ & E(x^{(k)}+td^{(k)})=e,\\ & t\geqslant 0.\end{aligned}\right\} \tag{3.12.15}$$

问题(3.12.15)可作进一步简化.

由于 $d^{(k)}$是可行方向,必有

$$Ed^{(k)}=0,$$

$$Ex^{(k)} = e.$$

因此,(3.12.15)中第二个约束是多余的.

此外,在点 $x^{(k)}$处,把不等式的约束区分为积极约束和不积极约束,其对应的系数矩阵分别记为 A_1 和 A_2,即

$$A_1 x^{(k)} = b_1, \tag{3.12.16}$$

$$A_2 x^{(k)} < b_2. \tag{3.12.17}$$

不妨假设

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}. \tag{3.12.18}$$

这样(3.1.15)中第一个约束可以写成

$$\begin{bmatrix} A_1 x^{(k)} + tA_1 d^{(k)} \\ A_2 x^{(k)} + tA_2 d^{(k)} \end{bmatrix} \leqslant \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \tag{3.12.19}$$

由于 $d^{(k)}$为可行方向,$A_1 d^{(k)} \leqslant 0, t \geqslant 0$,以及 $A_1 x^{(k)} = b_1$,因此

$$A_1 x^{(k)} + tA_1 d^{(k)} \leqslant b_1$$

自然成立.约束条件(3.12.19)简化为

$$A_2 x^{(k)} + tA_2 d^{(k)} \leqslant b_2. \tag{3.12.20}$$

这样,问题(3.12.15)简化为

$$\left.\begin{aligned} \min \quad & f(x^{(k)} + td^{(k)}), \\ \text{s.t.} \quad & A_2 x^{(k)} + tA_2 d^{(k)} \leqslant b_2, \\ & t \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{3.12.21}$$

根据(3.12.21)的约束条件,容易求出 t 的上限,令

$$\hat{b} = b_2 - A_2 x^{(k)}, \tag{3.12.22}$$

$$\hat{d} = A_2 d^{(k)}. \tag{3.12.23}$$

由(3.12.17)知 $\hat{b} > 0$.(3.12.21)的约束条件可以写成

$$\begin{cases} t\hat{d} \leqslant \hat{b}, \\ t \geqslant 0. \end{cases}$$

由此得到 t 的上限为

$$t_{\max} = \begin{cases} \infty, & \hat{d} \leqslant 0; \\ \min\left\{ \dfrac{\hat{b}_i}{\hat{d}_i} \mid \hat{d}_i > 0 \right\}, & \text{其他}. \end{cases} \tag{3.12.24}$$

问题(3.12.15)最终简化成

$$\left.\begin{aligned} \min \quad & f(x^{(k)} + td^{(k)}), \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leqslant t \leqslant t_{\max}, \end{aligned}\right\} \tag{3.12.25}$$

$t_{\max}$由(3.12.24)确定.

综上所述,给定问题(3.12.1)和一个可行点以后,可以通过求解问题(3.12.10)得到下降可行方向,通过求解问题(3.12.25)确定沿此方向进行一维搜索的步长.

最后,确定初始可行点.实际上,解决这个问题的基本思想在研究线性规划时已经提出.为求(3.12.1)的一个可行点,引入人工变量(向量)ξ 和 η,解辅助线性规划

$$
\left.\begin{array}{ll}
\min & \left(\sum_{i=1}^{m} \xi_i + \sum_{i=1}^{l} \eta_i\right) \\
\text{s.t.} & Ax + \xi \leqslant b, \\
& Ex + \eta = e, \\
& \xi \geqslant 0, \eta \geqslant 0.
\end{array}\right\} \tag{3.12.26}
$$

如果(3.12.26)的最优解

$$(\bar{x}, \bar{\zeta}, \bar{\eta}) = (\bar{x}, 0, 0),$$

那么 $\bar{x}$ 就是(3.12.1)的一个可行解.

当然,如果通过观察和试算容易求得初始可行解,就不必再解线性规划(3.12.26).

可行方向法的算法步骤如下.

(1) 给定初始可行点 $x^{(1)}$,令 $k=1$.

(2) 在点 $x^{(k)}$处把 A 和 b 分解成

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \text{和} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

使得 $A_1 x^{(k)} = b_1, A_2 x^{(k)} < b_2$. 计算 $\nabla f(x^{(k)})$.

(3) 求解线性规划问题

$$
\begin{array}{ll}
\min & \nabla f(x^{(k)})^{\mathrm{T}} d, \\
\text{s.t.} & A_1 d \leqslant 0, \\
& Ed = 0, \\
& -1 \leqslant d_j \leqslant 1, \quad j = 1, \cdots, n.
\end{array}
$$

得到最优解 $d^{(k)}$.

(4) 如果 $\nabla f(x^{(k)})^{\mathrm{T}} d^{(k)} = 0$,则停止计算,$x^{(k)}$为 K-T 点;否则,转(5).

(5) 利用(3.12.22)~(3.12.24)计算 $t_{\max}$,然后,在$[0, t_{\max}]$上作一维搜索:

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x^{(k)} + td^{(k)}), \\
\text{s.t.} & 0 \leqslant t \leqslant t_{\max}.
\end{array}
$$

得到最优解 t_k,令

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}.$$

(6) 令 $k = k+1$,返回(2).

例 3.18 用 Zoutendijk 法解下列问题:

$$
\begin{array}{ll}
\min & x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 4x_2 + 6, \\
\text{s.t.} & 2x_1 - x_2 - 1 \leqslant 0, \\
& x_1 + x_2 - 2 \leqslant 0, \\
& -x_1 \leqslant 0, \\
& -x_2 \leqslant 0,
\end{array}
$$

解 取初始可行点 $x^{(1)} = (0,0)^{\mathrm{T}}$.

第一次迭代

$\nabla f(x^{(1)}) = (-2, -4)^{\mathrm{T}}$,在 $x^{(1)}$处,积极约束和不积极约束的系数矩阵及右端分别为

$$A_1=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},A_2=\begin{pmatrix}2 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix};$$

$$b_1=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},b_2=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}.$$

先求在 $x^{(1)}$处的下降可行方向,解线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & \nabla f(x^{(1)})^{\mathrm T}d,\\ \text{s.t.}\quad & A_1d\leqslant 0,\\ & |d_j|\leqslant 1,j=1,2.\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}\min\quad & -2d_1-4d_2\\ \text{s.t.}\quad & d_1\geqslant 0,\\ & d_2\geqslant 0,\\ & -1\leqslant d_1\leqslant 1,\\ & -1\leqslant d_2\leqslant 1.\end{aligned}$$

由单纯形方法求得最优解

$$d^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}.$$

再求步长 t_1:

$$\hat{d}=A_2d^{(1)}=\begin{pmatrix}2 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix},$$

$$\hat{b}=b_2-A_2x^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix},$$

$$t_{\max}=\min\left\{\frac{1}{1},\frac{2}{2}\right\}=1.$$

解一维搜索问题

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x^{(1)}+td^{(1)})=2t^2-6t+6,\\ \text{s.t.}\quad & 0\leqslant t\leqslant 1,\end{aligned}$$

得

$$t_1=1.$$

令

$$x^{(2)}=x^{(1)}+t_1d^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$

第二次迭代

$$\nabla f(x^{(2)})=(0,-2)^{\mathrm T},$$

$$A_1=\begin{pmatrix}2 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix},A_2=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix};$$

$$b_1=\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix},b_2=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

解线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & -2d_2,\\ \text{s.t.}\quad & 2d_1-d_2\leqslant 0,\\ & d_1+d_2\leqslant 0,\\ & -1\leqslant d_1\leqslant 1,\\ & -1\leqslant d_2\leqslant 1.\end{aligned}$$

用单纯形方法求得最优解

$$d^{(2)}=\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}.$$

再沿 $d^{(2)}$搜索，求步长 t_2：

$$\hat{b}=b_2-A_2x^{(2)}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$

$$\hat{d}=A_2d^{(2)}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

得到 $t_{\max}=1$.

求解一维搜索问题

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x^{(2)}+td^{(2)})=2t^2-2t+2,\\ \text{s.t.}\quad & 0\leqslant t\leqslant 1.\end{aligned}$$

得 $t_2=\dfrac{1}{2}$. 令

$$\begin{aligned}x^{(3)}&=x^{(2)}+t_2d^{(2)}\\ &=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{3}{2}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

第三次迭代

$$\nabla f(x^{(3)})=(-1,-1)^{\mathrm{T}},$$

$$A_1=(1,1),A_2=\begin{pmatrix}2&-1\\-1&0\\0&-1\end{pmatrix};$$

$$b_1=(2),b_2=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}.$$

解线性规划

$$\begin{aligned}\min\quad & -d_1-d_2,\\ \text{s.t.}\quad & d_1+d_2\leqslant 0,\\ & -1\leqslant d_1\leqslant 1,\\ & -1\leqslant d_2\leqslant 1.\end{aligned}$$

用单纯形法求得最优解

$$d^{(3)}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

根据定理 3.42，$x^{(3)}=\left(\frac{1}{2},\ \frac{3}{2}\right)^{\mathrm{T}}$是 K-T 点．由于此例是凸规划，因此 $x^{(3)}$是最优解，目标函数的最优值为

$$f_{\min}=f(x^{(3)})=\frac{3}{2}.$$

3.12.2 非线性约束情形

考虑不等式约束问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & g_i(x)\leqslant 0,\quad i=1,\cdots,m.\end{array}\right\}\tag{3.12.27}$$

其中，$x\in E^n$，$f(x)$，$g_i(x)$均为可微函数．

先讨论怎样求下降可行方向．

定理 3.43 设 x 是问题(3.12.27)的可行解，$I=\{i\mid g_i(x)=0\}$是在 x 处积极约束下标集，又设函数 $f(x)$，$g_i(x)(i\in I)$，在 x 处可微，函数 $g_i(x)(i\notin I)$在 x 处连续．如果

$$\begin{cases}\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d<0,\\ \nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d<0,\quad i\in I,\end{cases}$$

则 d 是下降可行方向．

证明 设方向 d 满足$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d<0$ 及$\nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d<0(i\in I)$．

当 $i\notin I$ 时，$g_i(x)<0$．由于 $g_i(x)(i\notin I)$ 在 x 处连续，因此对足够小的 $t>0$，必有

$$g_i(x+td)<0,\quad i\notin I.\tag{3.12.28}$$

当 $i\in I$ 时，由于 $g_i(x)$在 x 处可微，必有

$$g_i(x+td)=g_i(x)+t\nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d+o(td),$$

由此得

$$\frac{g_i(x+td)-g_i(x)}{t}=\nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d+\frac{o(td)}{t}.\tag{3.12.29}$$

已知$\nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d<0$，因此当 $t>0$ 充分小时，(3.12.29)右端小于零，由此推得左端小于零．由于 $g_i(x)=0(i\in I)$，所以 $g_i(x+td)\leqslant 0$．

由以上分析即知，对足够小的 $t>0$，必有

$$g_i(x+td)\leqslant 0,\quad i=1,\cdots,m.\tag{3.12.30}$$

因此 d 为 x 处的可行方向．又由于$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d<0$，因此 d 是 x 处下降可行方向．

根据上述定理，求下降可行方向也就是求满足下列不等式组的解 d：

$$\begin{array}{l}\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d<0,\\ \nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d<0,\quad i\in I.\end{array}$$

进而归结为求解下列线性规划问题：

$$\left.\begin{array}{ll}\min & z,\\ \text{s.t.} & \nabla f(x)^{\mathrm{T}}d-z\leqslant 0,\\ & \nabla g_i(x)^{\mathrm{T}}d-z\leqslant 0,\quad i\in I,\\ & |d_j|\leqslant 1,\quad j=1,\cdots,n.\end{array}\right\}\tag{3.12.31}$$

设(3.12.31)的最优解为$(\bar{z},\bar{d})$．如果 $\bar{z}<0$，则 $\bar{d}$ 是在 x 处的下降可行方向；如果 $\bar{z}=$

0，下面将证明，相应的 x 必为 Fritz John 点.

定理 3.44 设 x 是问题(3.12.27)的可行解，$I=\{i\mid g_i(x)=0\}$，则 x 是 Fritz John 点的充要条件是问题(3.12.31)的目标函数最优值等于零.

证明 对于问题(3.12.31)，目标函数值等于零的充要条件是不等式组

$$\left.\begin{aligned}&\nabla f(x)^{\mathrm T}d<0,\\&\nabla g_i(x)^{\mathrm T}d<0,\quad i\in I\end{aligned}\right\}\tag{3.12.32}$$

无解.

根据 Gordan 定理，(3.12.32)无解的充要条件是存在不全为零的数 $u_0\geqslant0$ 和 $u_i\geqslant0$，$i\in I$，使得

$$u_0\nabla f(x)+\sum_{i\in I}u_i\nabla g_i(x)=\mathbf{0},$$

即 x 是 Fritz John 点.

为了确定步长 t_k，仍然需要求解一维搜索问题：

$$\left.\begin{aligned}&\min\quad f(x^{(k)}+td^{(k)}),\\&\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant t_{\max}.\end{aligned}\right\}\tag{3.12.33}$$

其中

$$t_{\max}=\sup\{t\mid g_i(x^{(k)}+td^{(k)})\leqslant0,\ i=1,\cdots,m\}.\tag{3.12.34}$$

算法步骤如下：

(1) 给定初始可行点 $x^{(1)}$，令 $k=1$.

(2) 令 $I=\{i\mid g_i(x^{(k)})=0\}$，解线性规划问题：

$$\begin{aligned}\min\quad&z\\\text{s.t.}\quad&\nabla f(x^{(k)})^{\mathrm T}d-z\leqslant0,\\&\nabla g_i(x^{(k)})^{\mathrm T}d-z\leqslant0,\quad i\in I,\\&-1\leqslant d_j\leqslant1,\quad j=1,\cdots,n.\end{aligned}$$

得最优解$(z_k,d^{(k)})$，若 $z_k=0$，则停止计算，$x^{(k)}$为 Fritz John 点；否则，转(3).

(3) 求解一维搜索问题：

$$\begin{aligned}&\min\quad f(x^{(k)}+td^{(k)}),\\&\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant t_{\max}.\end{aligned}$$

其中，$t_{\max}$由(3.12.34)确定，得到最优解 t_k.

(4) 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}$，令 $k=k+1$，返回(2).

3.13 Rosen 梯度投影法

在研究无约束最优化算法时已经知道，负梯度方向是个局部的最速下降方向．然而，当约束存在时，沿最速下降方向可能导致非可行解．1960 年，Rosen 提出梯度投影法，把负梯度方向在某个子空间内投影，使得沿着这样一个投影方向目标值可以得到改善，同时保持可行性.

3.13.1 投影矩阵

定义 3.21 投影矩阵(projection matrix) 设 P 为 n 阶方阵，若 $P=P^{\mathrm T}$，且 $P^2=P$，则

称 $\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵.

投影矩阵具有下列性质：

(1) 若 $\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵,则 $\boldsymbol{P}$ 为半正定矩阵.这是因为,对任意 $\boldsymbol{x}\in E^n$,有

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})\geqslant 0.$$

(2) $\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵的充要条件是 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵.

(3) 设 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 是 n 阶投影矩阵,则

$$L=\{\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}\in E^n\}$$

与

$$L^{\perp}=\{\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}\in E^n\}$$

是正交线性子空间,且任意 $\boldsymbol{x}\in E^n$ 可唯一分解成 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{p}\in L$, $\boldsymbol{q}\in L^{\perp}$.

设 $\boldsymbol{M}$ 是 $m\times n$ 矩阵,秩为 m, $\boldsymbol{y}$ 为任意 n 维向量.令

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{M}, \tag{3.13.1}$$

$$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{M}. \tag{3.13.2}$$

可以验证, $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{Q}$ 均为投影矩阵. $\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$ 就是向量 $\boldsymbol{y}$ 在 $\boldsymbol{M}$ 的行向量所生成的子空间上的投影,而向量 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}$ 则是向量 $\boldsymbol{y}$ 在 $\boldsymbol{M}$ 的零空间上的投影,即 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}$ 满足 $\boldsymbol{M}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$.而且,向量 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}$ 是正交的.

3.13.2 梯度投影法原理

考虑问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f(\boldsymbol{x}),\\ \text{s.t.} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leqslant \boldsymbol{b},\\ & \boldsymbol{E}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}.\end{array}\right\} \tag{3.13.3}$$

其中, $f(\boldsymbol{x})$ 是可微函数, $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵, $\boldsymbol{E}$ 为 $l\times n$ 矩阵.

梯度投影法的基本思想仍然是从可行点出发,沿可行方向进行搜索.当迭代出发点在可行域内部时,沿负梯度方向搜索.当迭代出发点在某些约束的边界条件上时,将该点处的负梯度投影到 $\boldsymbol{M}$($\boldsymbol{M}$ 是以积极约束或部分积极约束的梯度为行构造成的矩阵)的零空间,再沿此投影方向进行搜索.可以证明,这样的投影是下降可行方向,因此,Rosen 梯度投影法也是可行方向法.

定理 3.45 设 $\boldsymbol{x}$ 是问题(3.13.3)的可行解,在点 $\boldsymbol{x}$ 处,有 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}<\boldsymbol{b}_2$,其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_1\\ \boldsymbol{A}_2\end{pmatrix},\ \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_1\\ \boldsymbol{b}_2\end{pmatrix}.$$

又设

$$\boldsymbol{M}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_1\\ \boldsymbol{E}\end{pmatrix}$$

为满秩矩阵, $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{M}$, $\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x})\neq\boldsymbol{0}$,令

$$\boldsymbol{d}=-\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x}),$$

则 $\boldsymbol{d}$ 是下降可行方向.

证明 由于 $\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵, $\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x})\neq\boldsymbol{0}$,因此必有

$$\begin{aligned}\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}&=-\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x})\\&=-\|\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x})\|^2<0,\end{aligned} \tag{3.13.4}$$

即 $\boldsymbol{d}$ 为下降方向.根据假设,又有

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{d}=-\boldsymbol{M}\boldsymbol{P}\nabla f(\boldsymbol{x})$$

$$= -M(I - M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M)\nabla f(x)$$
$$= (-M + M)\nabla f(x) = 0,$$

即 $A_1 d = 0, Ed = 0$,根据定理 3.41,d 是在 x 处的可行方向.考虑到(3.13.4),d 是下降可行方向.

上述定理,在 $P\nabla f(x) \neq 0$ 的假设下,给出用投影求下降可行方向的一种方法.当 $P\nabla f(x) = 0$ 时,可以证明存在两种可能,或者 x 是 K-T 点,或者可以构造新的投影矩阵,以便求得下降可行方向.

定理 3.46 设 x 是问题(3.13.3)的一个可行解,在点 x 处,有 $A_1 x = b_1, A_2 x < b_2$,其中

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

又设

$$M = \begin{pmatrix} A_1 \\ E \end{pmatrix}$$

为满秩矩阵,令

$$P = I - M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M,$$
$$W = -(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M\nabla f(x) = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.$$

其中,u 分 v 别对应于 A_1 和 E,设 $P\nabla f(x) = 0$,则

(1) 如果 $u \geqslant 0$,那么点 x 为 K-T 点;

(2) 如果 u 中含有负分量,不妨设 $u_j < 0$,这时从 A_1 中去掉 u_j 对应的行向量,得到 $\hat{A}_1$,令

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 \\ E \end{pmatrix},$$
$$\hat{P} = I - \hat{M}^{\mathrm{T}}(\hat{M}\hat{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\hat{M},$$
$$d = -\hat{P}\nabla f(x).$$

那么 d 为下降可行方向.

证明 (1) 设 $u \geqslant 0$,由于 $P\nabla f(x) = 0$,则有

$$\begin{aligned} 0 &= P\nabla f(x) \\ &= (I - M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M)\nabla f(x) \\ &= \nabla f(x) - M^{\mathrm{T}}(MM^{\mathrm{T}})^{-1}M\nabla f(x) \\ &= \nabla f(x) + A_1^{\mathrm{T}}u + E^{\mathrm{T}}v. \end{aligned} \tag{3.13.5}$$

(3.13.5)恰为 K-T 条件,因此,x 是 K-T 点.

(2) 设 $u_j < 0$.先证 $\hat{P}\nabla f(x) \neq 0$,用反证法.假设 $\hat{P}\nabla f(x) = 0$.由 $\hat{P}$ 的定义可以推出

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{P}\nabla f(x) \\ &= (I - \hat{M}^{\mathrm{T}}(\hat{M}\hat{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\hat{M})\nabla f(x) \\ &= \nabla f(x) + \hat{M}^{\mathrm{T}}\hat{W}. \end{aligned} \tag{3.13.6}$$

其中,$\hat{W} = -(\hat{M}\hat{M}^{\mathrm{T}})^{-1}\hat{M}\nabla f(x)$.设 A_1 中对应 u_j 的行向量为 r_j(第 j 行).由于

$$A_1^{\mathrm{T}}u + E^{\mathrm{T}}v = \hat{A}_1^{\mathrm{T}}\hat{u} + u_j r_j^{\mathrm{T}} + E^{\mathrm{T}}v$$

$$= \hat{M}^{T}\overline{W} + u_j r_j^{T}, \tag{3.13.7}$$

把(3.13.7)代入(3.13.5),则

$$0 = \nabla f(x) + \hat{M}^{T}\overline{W} + u_j r_j^{T}, \tag{3.13.8}$$

由(3.13.6)~(3.13.8),得

$$0 = \hat{M}^{T}(\overline{W} - \hat{M}) + u_j r_j^{T} \tag{3.3.19}$$

(3.13.9)右端等于 M 的行向量的线性组合,且至少有一个系数 $u_j \neq 0$.由此得出 M 的行向量组线性相关,这个结论与 M 行满秩矛盾.因此必有 $\hat{P}\nabla f(x) \neq 0$.

由于 $\hat{P}$ 为投影矩阵,$\hat{P}\nabla f(x) \neq 0$,则

$$\begin{aligned} \nabla f(x)^{T} d &= -\nabla f(x)^{T}\hat{P}\,\nabla f(x) \\ &= -\|\hat{P}\,\nabla f(x)\|^{2} < 0. \end{aligned} \tag{3.13.10}$$

因此 $d = -\hat{P}\nabla f(x)$是下降方向.下面证明 d 为可行方向.由于

$$\hat{M}d = -\hat{M}\hat{P}\,\nabla f(x) = -\hat{M}(I - \hat{M}^{T}(\hat{M}\hat{M}^{T})^{-1}\hat{M})\nabla f(x) = -(\hat{M} - \hat{M})\nabla f(x) = 0,$$

即

$$\hat{A}_1 d = 0, \ Ed = 0. \tag{3.13.11}$$

由(3.13.8)两端左乘 $r_j\hat{P}$,得

$$r_j\hat{P}\,\nabla f(x) + r_j\hat{P}\hat{M}^{T}\overline{W} + u_j r_j \hat{P} r_j^{T} = 0.$$

由于 $\hat{P}\hat{M}^{T} = 0$, $d = -\hat{P}\nabla f(x)$,故

$$-r_j d + u_j r_j \hat{P} r_j^{T} = 0, \tag{3.13.12}$$

由于 $\hat{P}$ 半正定,$r_j\hat{P}r_j^{T} \geqslant 0$ 及 $u_j < 0$,因此

$$r_j d = u_j r_j \hat{P} r_j^{T} \leqslant 0. \tag{3.13.13}$$

由(3.13.11)和(3.13.13)知

$$A_1 d \leqslant 0, \ Ed = 0.$$

根据定理 3.41,d 为可行方向.考虑到(3.13.10),d 为 x 处的下降可行方向.

梯度投影法的算法步骤如下:

(1) 给定初始可行点 $x^{(1)}$,令 $k=1$.

(2) 在点 $x^{(k)}$处,将 A 和 b 分解成

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

使得 $A_1 x^{(k)} = b_1$, $A_2 x^{(k)} < b_2$.

(3) 令

$$M = \begin{pmatrix} A_1 \\ E \end{pmatrix},$$

如果 M 是空的,则令

$$P = I(\text{单位矩阵});$$

否则,令

$$P = I - M^{T}(MM^{T})^{-1}M.$$

(4) 令 $d^{(k)} = -P\nabla f(x^{(k)})$.若 $d^{(k)} \neq 0$,则转(6);若 $d^{(k)} = 0$,则转(5).

(5) 若 M 是空的,则停止计算,得到 $x^{(k)}$;否则令

$$W = -(MM^{T})^{-1}M\,\nabla f(x^{(k)}) = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.$$

如果 $u \geqslant 0$,则计算停止,$x^{(k)}$为 K-T 点;如果 u 包含负分量,则选择一个负分量,比如 u_j,修

正 A_1，去掉 A_1 中对应 u_j 的行，返回(3).

(6) 解下列问题，求步长 t_k：

$$\begin{aligned}&\min\quad f(x^{(k)}+td^{(k)}),\\&\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant t_{\max}.\end{aligned}$$

其中，$t_{\max}$ 由(3.12.24)确定.解得 t_k，令

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)},$$

令 $k=k+1$，返回(2).

例 3.19 用 Rosen 梯度投影法求解下列问题：

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x)=2x_1^2+2x_2^2-2x_1x_2-4x_1-6x_2,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+\ x_2\leqslant 2,\\ & x_1+5x_2\leqslant 5,\\ & -x_1\leqslant 0,\\ & -x_2\leqslant 0.\end{aligned}$$

解 取初始可行点 $x^{(1)}=(0,0)^{\mathrm T}$.在点 x 处的梯度为

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}4x_1-2x_2-4\\4x_2-2x_1-6\end{pmatrix}.$$

第一次迭代

在点 $x^{(1)}$ 的梯度为

$$\nabla f(x^{(1)})=\begin{pmatrix}-4\\-6\end{pmatrix}.$$

在 $x^{(1)}$ 处积极约束指标集 $I=\{3,4\}$，因此将约束系数矩阵 A 和右端 b 分解为

$$A_1=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix},A_2=\begin{pmatrix}1&1\\1&5\end{pmatrix},$$

$$b_1=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},b_2=\begin{pmatrix}2\\5\end{pmatrix}.$$

投影矩阵为

$$\begin{aligned}P&=I-A_1^{\mathrm T}(A_1A_1^{\mathrm T})^{-1}A_1\\&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right)^{-1}\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}0&0\\0&0\end{pmatrix},\end{aligned}$$

$$d^{(1)}=-p\nabla f(x^{(1)})=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

令
$$W=-(A_1A_1^{\mathrm T})^{-1}A_1\nabla f(x^{(1)})=\begin{pmatrix}-4\\-6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}.$$

修正 A_1，去掉 A_1 中对应 $u_2=-6$ 的行，即第 2 行，得到 $\hat{A}_1=(-1,0)$.

再求投影矩阵 $\hat{P}$：

$$\begin{aligned}\hat{P}&=I-\hat{A}_1^{\mathrm T}(\hat{A}_1\hat{A}_1^{\mathrm T})^{-1}\hat{A}_1\\&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix}\left([-1,0]\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix}\right)^{-1}(-1,0)=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix},\end{aligned}$$

$$\hat{d}^{(1)} = -\hat{P}\nabla f(x^{(1)}) = -\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -4 \\ -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

求步长 t_1:

$$\left.\begin{array}{ll} \min & f(x^{(1)} + t\hat{d}^{(1)}), \\ \text{s.t.} & 0 \leqslant t \leqslant t_{\max}. \end{array}\right\} \tag{3.13.14}$$

由于

$$\hat{b} = b_2 - A_2 x^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix},$$

$$\hat{d} = A_2 \hat{d}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 30 \end{pmatrix}.$$

因此

$$t_{\max} = \min\left\{\frac{2}{6}, \frac{5}{30}\right\} = \frac{1}{6}.$$

这样,(3.13.14)即

$$\begin{array}{ll} \min & 72t^2 - 36t \\ \text{s.t.} & 0 \leqslant t \leqslant \dfrac{1}{6}. \end{array}$$

解得 $t_1 = \dfrac{1}{6}$.令

$$x^{(2)} = x^{(1)} + t_1 d^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

第二次迭代

在点 $x^{(2)}$处,起作用约束指标集 $I = \{2,3\}$,梯度

$$\nabla f(x^{(2)}) = \begin{pmatrix} -6 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

A 和 b 分解成

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$b_1 = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

投影矩阵

$$\begin{aligned} P &= I - A_1^{\mathrm{T}}(A_1 A_1^{\mathrm{T}})^{-1} A_1 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix} 1 & 5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}\right)^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 26 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

这样,方向

$$d^{(2)} = -P\nabla f(x^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = -(A_1 A_1^{\mathrm{T}})^{-1} A_1 \nabla f(x^{(2)}) = \begin{pmatrix} \dfrac{2}{5} \\ -\dfrac{28}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}.$$

从 A_1 中去掉 $u_2=-\frac{28}{5}$ 所对应的第 2 行，得到

$$\hat{A}_1=(1,5).$$

令
$$\hat{P}=I-\hat{A}_1^{\mathrm{T}}(\hat{A}_1\hat{A}_1^{\mathrm{T}})^{-1}\hat{A}_1$$
$$=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1\\5\end{pmatrix}\left((1,5)\begin{pmatrix}1\\5\end{pmatrix}\right)^{-1}(1,5)=\begin{pmatrix}\frac{25}{26}&-\frac{5}{26}\\-\frac{5}{26}&\frac{1}{26}\end{pmatrix}.$$

令
$$\hat{d}^{(2)}=-\hat{P}\,\nabla f(x^{(2)})=\frac{14}{13}\begin{pmatrix}5\\-1\end{pmatrix},$$

不妨去掉前面的系数，取搜索方向

$$d^{(2)}=\begin{pmatrix}5\\-1\end{pmatrix}.$$

这时，有
$$\hat{b}=b_2-A_2x^{(2)}$$
$$=\begin{pmatrix}2\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&1\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$
$$\hat{d}=A_2d^{(2)}$$
$$=\begin{pmatrix}1&1\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}5\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\1\end{pmatrix}.$$
$$t_{\max}=\min\left\{\frac{1}{4},\frac{1}{1}\right\}=\frac{1}{4},$$
$$x^{(2)}+td^{(2)}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+t\begin{pmatrix}5\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5t\\1-t\end{pmatrix}.$$

则
$$f(x^{(2)}+td^{(2)})=62t^2-28t-4.$$

求解问题
$$\min\quad 62t^2-28t-4,$$
$$\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant\frac{1}{4}.$$

得到 $t_2=\frac{7}{31}$. 令

$$x^{(3)}=x^{(2)}+td^{(2)}=\begin{pmatrix}\frac{35}{31}\\\frac{24}{31}\end{pmatrix}.$$

第三次迭代

在点 $x^{(3)}$ 处起作用约束指标集 $I=\{2\}$，梯度为

$$\nabla f(x^{(3)})=\begin{pmatrix}-\frac{32}{31}\\-\frac{160}{31}\end{pmatrix},$$

将 A 和 b 分解为

$$A_1=(1,5),\ A_2=\begin{pmatrix}1&1\\-1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$b_1=(5),\ b_2=\begin{pmatrix}2\\0\\0\end{pmatrix},$$

投影矩阵为

$$\begin{aligned}P&=I-A_1^{\mathrm{T}}(A_1A_1^{\mathrm{T}})^{-1}A_1\\&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1\\5\end{pmatrix}\left((1,5)\begin{pmatrix}1\\5\end{pmatrix}\right)^{-1}(1,5)=\frac{1}{26}\begin{pmatrix}25&-5\\-5&1\end{pmatrix},\end{aligned}$$

则
$$d^{(3)}=-P\nabla f(x^{(3)})=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$

有
$$W=-(A_1A_1^{\mathrm{T}})^{-1}A_1\nabla f(x^{(3)})=\frac{32}{31}>0.$$

根据定理 3.46,必有

$$x^{(3)}=\begin{pmatrix}\frac{35}{31}\\\frac{24}{31}\end{pmatrix}$$

为 K-T 点.由于本例为凸规划,$x^{(3)}$是全局最优解.

3.14 既约梯度法

3.14.1 Wolfe 既约梯度法

Wolfe 于 1963 年提出产生下降可行方向的另一种方法,称为既约梯度法(reduced gradient method),简称为 RG 算法.

下面介绍这种方法.考虑具有线性约束的非线性规划问题:

$$\left.\begin{aligned}\min\quad&f(x),\\\text{s.t.}\quad&Ax=b,\\&x\geqslant 0.\end{aligned}\right\}\tag{3.14.1}$$

其中,A 是 $m\times n$ 矩阵,秩为 m,b 是 m 维列向量,f 是E^n 上的连续可微函数.假设 A 的任意 m 个列均线性无关,并且约束条件的每个基本可行解均有 m 个正分量,在此假设下,每个可行解至少有 m 个正分量、至多有 $n-m$ 个零分量.

Wolfe 既约梯度法的基本思想是把变量分为基变量(m 个)和非基变量($n-m$ 个),它们之间的关系由约束条件 $Ax=b$ 确定,将基变量用非基变量表示,并从目标函数中消去基变量,得到以非基变量为自变量的简化的目标函数,进而利用此函数的负梯度构造下降可行方向,简化目标函数关于非基变量的梯度称为目标函数的既约梯度.下面分析怎样用既约梯度构造搜索方向.

像研究线性规划那样,将 A 和 x 进行分解,不失一般性,可令

$$A=(B,N),\ x=\begin{pmatrix}x_B\\x_N\end{pmatrix}.$$

其中,B 是 $m\times m$ 可逆矩阵,x_B 和 x_N 分别是由基变量和非基变量构成的向量.这样,(3.14.1)可以表达为

$$\min \quad f(x_B, x_N), \tag{3.14.2}$$

$$\text{s.t.} \quad Bx_B + Nx_N = b, \tag{3.14.3}$$

$$x_B, \quad x_N \geqslant 0. \tag{3.14.4}$$

由(3.14.3)可以得出

$$x_B = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N. \tag{3.14.5}$$

把(3.14.5)代入(3.14.2),得到仅以 x_N 为自变量的函数为

$$F(x_N) = f(x_B(x_N), x_N). \tag{3.14.6}$$

这样就把原来问题简化为仅在变量非负限制下极小化 $F(x_N)$,即

$$\left.\begin{aligned} &\min \quad F(x_N), \\ &\text{s.t.} \quad x_B, x_N \geqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{3.14.7}$$

利用复合函数求导法则,可求得 $F(x_N)$的梯度,即 $f(x)$的既约梯度为

$$\begin{aligned} r(x_N) &= \nabla F(x_N) \\ &= \nabla_{x_N} f(x_B(x_N), x_N) - (B^{-1}N)^{\mathrm{T}} \nabla_{x_B} f(x_B(x_N), x_N), \end{aligned} \tag{3.14.8}$$

显然,沿着负既约梯度方向$(-r(x_N))$移动 x_N,能使目标函数值下降.

现在研究怎样确定在点 $x^{(k)}$处的下降可行方向 $d^{(k)}$,使得后继点

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}$$

是可行点,且目标函数值下降.为此,写作

$$d^{(k)} = \begin{bmatrix} d_B^{(k)} \\ d_N^{(k)} \end{bmatrix}.$$

其中,$d_B^{(k)}$ 和 $d_N^{(k)}$ 分别对应基变量和非基变量.为使目标函数值下降,$d_N^{(k)}$ 应取负既约梯度方向,但是当某个分量 $x_{N_j}=0$,且 $r_j(x_N)>0$时,沿负既约梯度方向将导致

$$x_{N_j} - tr_j(x_N) < 0, \quad t > 0.$$

因而破坏可行性.因此,定义 $d_N^{(k)}$,使

$$d_{N_j}^{(k)} = \begin{cases} -x_{N_j}^{(k)} r_j(x_N^{(k)}), & r_j(x_N^{(k)}) > 0, \\ -r_j(x_N^{(k)}), & r_j(x_N^{(k)}) \leqslant 0. \end{cases} \tag{3.14.9}$$

定义 $d_N^{(k)}$ 后,为得到可行方向,根据定理 3.41,应有

$$Ad^{(k)} = 0,$$

即

$$Bd_B^{(k)} + Nd_N^{(k)} = 0.$$

因此取

$$d_B^{(k)} = -B^{-1}Nd_N^{(k)}. \tag{3.14.10}$$

由于 $x_B^{(k)}>0$,因此 $d_B^{(k)}$ 对于$x_B^{(k)}$ 也一定是可行方向.最终得

$$d^{(k)} = \begin{bmatrix} -B^{-1}Nd_N^{(k)} \\ d_N^{(k)} \end{bmatrix}. \tag{3.14.11}$$

余下的问题是确定步长 t_k.为保持

$$x^{(k+1)} \geqslant 0,$$

即

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} + td_j^{(k)} \geqslant 0, \quad j = 1, \cdots, n, \tag{3.14.12}$$

需确定 t 的取值范围.

当 $d_j^{(k)} \geqslant 0$ 时,对任意 $t \geqslant 0$,(3.14.12)恒成立.

当 $d_j^{(k)} < 0$ 时,应取

$$t \leqslant \frac{x_j^{(k)}}{-d_j^{(k)}}.$$

$$t_{\max} = \begin{cases} \infty, & d^{(k)} \geqslant 0, \\ \min\left\{-\dfrac{x_j^{(k)}}{d_j^{(k)}} \mid d_j^{(k)} < 0\right\}, & \text{其他}. \end{cases} \tag{3.14.13}$$

容易证明,当按照上述方式构造的方向 d 为零向量时,相应的点 x 必为 K-T 点;d 不为零向量时,它必是下降可行方向.

定理 3.47 设 x 是问题(3.14.1)的可行解,$A=(B,N)$是 $m \times n$ 矩阵,B 是 m 阶可逆矩阵,$x=(x_B^T, x_N^T)^T$,$x_B > 0$,函数 f 在点 x 处可微,又设 d 是由(3.14.9)和(3.14.10)定义的方向.如果 $d \neq 0$,则 d 是下降可行方向,而且 $d=0$ 的充要条件是 x 为 K-T 点.

证明 根据方向 d 的定义,有

$$Ad = Bd_B + Nb_N = B(-B^{-1}Nd_N) + Nd_N = 0.$$

根据(3.14.9),当 $x_{N_j}=0$ 时,$d_{N_j} \geqslant 0$,又 $x_B > 0$.根据定理 3.41,d 为可行方向.由于

$$\begin{aligned} \nabla f(x)^T d &= \nabla_{x_B} f(x)^T d_B + \nabla_{x_N} f(x)^T d_N \\ &= \nabla_{x_B} f(x)^T(-B^{-1}Nd_N) + \nabla_{x_N} f(x)^T d_N \\ &= r(x_N)^T d_N. \end{aligned}$$

当 $d_N \neq 0$ 时,根据(3.14.9)知 $r(x_N)^T d_N < 0$,d 是下降方向.故 d 是下降可行方向.

现在证明定理的后半部.可以知道,x 为 K-T 点的充要条件是,存在乘子 $u_B, u_N \geqslant 0$ 和 v,使得

$$\begin{pmatrix} \nabla_{x_B} f(x) \\ \nabla_{x_N} f(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B^T \\ N^T \end{pmatrix} v - \begin{pmatrix} u_B \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{3.14.14}$$

$$u_B^T x_B = 0, \tag{3.14.15}$$

$$u_N^T x_N = 0. \tag{3.14.16}$$

设 x 是 K-T 点,则上述条件成立.由于

$$x_B > 0, u_B \geqslant 0,$$

则由(3.14.15)得出 $u_B = 0$,从而由(3.14.14)得第 1 个方程,有

$$v = -(B^T)^{-1} \nabla_{x_B} f(x), \tag{3.14.17}$$

把(3.14.17)代入(3.14.14)的第 2 个方程,则

$$\begin{aligned} u_N &= \nabla_{x_N} f(x) - (B^{-1}N)^T \nabla_{x_B} f(x) \\ &= r(x_N) \geqslant 0. \end{aligned} \tag{3.14.18}$$

由(3.14.18)和(3.14.16)知

$$r(x_N)^T x_N = 0. \tag{3.14.19}$$

由于 $x_N \geqslant 0$,根据(3.14.19)得

$$r_j(x_N) x_{N_j} = 0. \tag{3.14.20}$$

由(3.14.18),(3.14.20),(3.14.9)和(3.14.10)可知

$$d=0.$$

反之,设 $d=0$,则 $r(x_N)$的分量均非负.令

$$u_N=r(x_N)=\nabla_{x_N}f(x)-(B^{-1}N)^{\mathrm{T}}\nabla_{x_B}f(x)\geqslant 0,$$

由(3.14.9)可知,(3.14.16)必成立.再令

$$u_B=0,\ v=-(B^{\mathrm{T}})^{-1}\nabla_{x_B}f(x),$$

则(3.14.14)和(3.14.15)均成立,所以 x 为 K-T 点.

既约梯度法的算法步骤如下:

(1) 给定初始可行点 $x^{(1)}$,允许误差 $\varepsilon>0$,令 $k=1$.

(2) 从 $x^{(k)}$中选择 m 个大分量,其下标集记作 J_k,A 的第 j 列记作 p_j,令 B 是由$\{p_j\mid j\in J_k\}$构成的 m 阶矩阵,N 是由$\{p_j\mid j\notin J_k\}$构成的 $m\times(n-m)$矩阵,由(3.14.8)求出 $r(x_N)$,并由(3.14.9)和(3.14.10)求出 $d_N^{(k)}$ 和 $d_B^{(k)}$,从而得到搜索方向 $d^{(k)}$.

(3) 若 $\|d^{(k)}\|\leqslant\varepsilon$,则停止计算,得到点 $x^{(k)}$;否则,转(4).

(4) 由(3.14.13)求 $t_{\max}$,从 $x^{(k)}$出发,沿 $d^{(k)}$搜索:

$$\begin{aligned}&\min\quad f(x^{(k)}+td^{(k)}),\\&\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant t_{\max}.\end{aligned}$$

得到最优解 t_k.

(5) 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}$,令 $k=k+1$,转(2).

例 3.20 用 Wolfe 既约梯度法求解下列问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & 2x_1^2+x_2^2,\\ \text{s.t.}\quad & x_1-x_2+x_3=2,\\ & -2x_1+x_2+x_4=1,\\ & x_j\geqslant 0,\quad j=1,2,3,4.\end{aligned}$$

解 取初始可行点 $x^{(1)}=(1,3,4,0)^{\mathrm{T}}$.在 x 处的梯度

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}4x_1\\2x_2\\0\\0\end{pmatrix}.$$

第一次迭代

$$J_1=\{2,3\},$$

$$\nabla f(x^{(1)})=(4,6,0,0)^{\mathrm{T}},$$

$$x_B=\begin{pmatrix}x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix},\ x_N=\begin{pmatrix}x_1\\x_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

相应地,把约束方程的系数矩阵 A 分解成B 和 N,有

$$B=\begin{pmatrix}-1&1\\1&0\end{pmatrix},\ B^{-1}=\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix},\ N=\begin{pmatrix}1&0\\-2&1\end{pmatrix},$$

$$r(x_N^{(1)})=\begin{pmatrix}4\\0\end{pmatrix}-\left(\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\-2&1\end{pmatrix}\right)^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}6\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-2&-1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}6\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}16\\-6\end{pmatrix},$$

$$d_N^{(1)}=\begin{pmatrix}d_1^{(1)}\\d_4^{(1)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-16\\6\end{pmatrix},$$

$$d_B^{(1)}=\begin{pmatrix}d_2^{(1)}\\d_3^{(1)}\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\-2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-16\\6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-38\\-22\end{pmatrix}.$$

由此得到搜索方向 $\quad d^{(1)}=(-16,-38,-22,6)^T.$

步长上限 $\quad t_{\max}=\min\left\{-\frac{1}{-16},-\frac{3}{-38},-\frac{4}{-22}\right\}=\frac{1}{16}.$

从 $x^{(1)}$ 出发，沿 $d^{(1)}$ 搜索：

$$x^{(1)}+td^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\3\\4\\0\end{pmatrix}+t\begin{pmatrix}-16\\-38\\-22\\6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1-16t\\3-38t\\4-22t\\6t\end{pmatrix},$$

$$f(x^{(1)}+td^{(1)})=2(1-16t)^2+(3-38t)^2.$$

求解问题

$$\begin{aligned}&\min\quad 2(1-16t)^2+(3-38t)^2,\\&\text{s.t.}\quad 0\leqslant t\leqslant\frac{1}{16}.\end{aligned}$$

得到 $t_1=\frac{1}{16},x^{(2)}=\left(0,\frac{5}{8},\frac{21}{8},\frac{3}{8}\right)^T.$

第二次迭代 $\quad J_2=\{2,3\},$

$$\nabla f(x^{(2)})=\left(0,\frac{5}{4},0,0\right)^T,$$

$$x_B^{(2)}=\begin{pmatrix}x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{8}\\\frac{21}{8}\end{pmatrix},$$

$$x_N^{(2)}=\begin{pmatrix}x_1\\x_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\\frac{3}{8}\end{pmatrix}.$$

计算得到 $\quad r(x_N^{(2)})=\begin{pmatrix}\frac{5}{2}\\-\frac{5}{4}\end{pmatrix},d_N^{(2)}=\begin{pmatrix}d_1^{(2)}\\d_4^{(2)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\\frac{5}{4}\end{pmatrix},d_B^{(2)}=\begin{pmatrix}d_2^{(2)}\\d_3^{(2)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{5}{4}\\-\frac{5}{4}\end{pmatrix}.$

搜索方向 $\quad d^{(2)}=\left(0,-\frac{5}{4},-\frac{5}{4},\frac{5}{4}\right)^T,t_{\max}=\min\left\{\frac{\frac{5}{8}}{\frac{5}{4}},\frac{\frac{21}{8}}{\frac{5}{4}}\right\}=\frac{1}{2},$

$$x^{(2)}+td^{(2)}=\begin{pmatrix}0\\\frac{5}{8}-\frac{5}{4}t\\\frac{21}{8}-\frac{5}{4}t\\\frac{3}{8}+\frac{5}{4}t\end{pmatrix},f(x^{(2)}+td^{(2)})=\left(\frac{5}{8}-\frac{5}{4}t\right)^2.$$

求解一维搜索问题

$$\min \quad \left(\frac{5}{8}-\frac{5}{4}t\right)^2,$$

$$\text{s.t.} \quad 0\leqslant t\leqslant \frac{1}{2}.$$

得到 $t_2=\frac{1}{2}$, $x^{(3)}=x^{(2)}+t_2 d^{(2)}=(0,0,2,1)^{\mathrm{T}}$.

第三次迭代

$\nabla f(x^{(3)})=(0,0,0,0)^{\mathrm{T}}$, 已达到最优解.如果仍用既约梯度法计算,那么 $J_3=\{3,4\}$,

$$x_B^{(3)}=\begin{pmatrix}x_3\\x_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix},\ x_N^{(3)}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$

$$B=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ B^{-1}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ N=\begin{pmatrix}1&-1\\-2&1\end{pmatrix}.$$

既约梯度

$$r(x_N^{(3)})=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}-\left(\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&-1\\-2&1\end{pmatrix}\right)^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

因此, $d^{(3)}=(0,0,0,0)^{\mathrm{T}}$, 根据定理 3.47, 点 $x^{(3)}=(0,0,2,1)^{\mathrm{T}}$是 K-T 点.由于本例是凸规划,因此 $x^{(3)}$是全局最优解.这个结果在计算之前就很容易观察得到.

3.14.2 广义既约梯度法

Abadie 和 Carpentier 把 Wolfe 既约梯度法推广到具有非线性约束的情形,给出广义既约梯度法(generalized reduced gradient method),简称为 GRG 算法.

现在考虑非线性规划问题

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & f(x),\\ \text{s.t.}\quad & h_j(x)=0,\quad j=1,\cdots,m\\ & l\leqslant x\leqslant u.\end{aligned}\right\}\tag{3.14.21}$$

其中, $f,h_j(j=1,\cdots,m)$是连续可微函数, $x\in E^n$, $m\leqslant n$, l 和 u 都是 n 维列向量:

$$l=\begin{bmatrix}l_1\\ \vdots\\ l_n\end{bmatrix},\ u=\begin{bmatrix}u_1\\ \vdots\\ u_n\end{bmatrix}.$$

为书写方便,令

$$h(x)=(h_1(x),\cdots,h_m(x))^{\mathrm{T}},$$

这样,(3.14.21)写成

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & f(x),\\ \text{s.t.}\quad & h(x)=0,\\ & l\leqslant x\leqslant u.\end{aligned}\right\}\tag{3.14.22}$$

类似于 RG 算法,把变量区分为基变量和非基变量,它们组成的向量分别用 x_B 和 x_N 表示.相应地,把 $h(x)$的 Jacobian 矩阵

$$\frac{\partial h}{\partial x}=\begin{pmatrix}\frac{\partial h_1}{\partial x_1} & \frac{\partial h_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}\\ \frac{\partial h_2}{\partial x_1} & \frac{\partial h_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_2}{\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial h_m}{\partial x_1} & \frac{\partial h_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}\end{pmatrix}, \tag{3.14.23}$$

分解成

$$\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}=\left(\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_B},\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_N}\right). \tag{3.14.24}$$

这里假定变量重新标号,使前 m 个分量是基变量,并假设$\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_B}$非奇异.这样,$\boldsymbol{x}_B$ 可用$\boldsymbol{x}_N$ 表示(至少可以这样想像),从而把目标函数化成(或想像成)只是 $\boldsymbol{x}_N$ 的函数,即

$$f(\boldsymbol{x}_B(\boldsymbol{x}_N),\boldsymbol{x}_N)=F(\boldsymbol{x}_N).$$

下面推导 f 的既约梯度

$$\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}_N)=\nabla F(\boldsymbol{x}_N) \tag{3.14.25}$$

的表达式.

由于基变量与非基变量之间的关系由隐式确定,所以试图解出基变量,再代入目标函数,使目标函数只含非基变量,在实际应用中,一般并非可行.因此,采用微分法求广义的既约梯度.目标函数的微分

$$\mathrm{d}f=(\nabla_{\boldsymbol{x}_B}f)^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{x}_B+(\nabla_{\boldsymbol{x}_N}f)^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{x}_N. \tag{3.14.26}$$

其中,

$$\nabla_{\boldsymbol{x}_B}f=\left(\frac{\partial f}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_m}\right)^{\mathrm{T}}, \tag{3.14.27}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}_N}f=\left(\frac{\partial f}{\partial x_{m+1}},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{3.14.28}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x}_B=(\mathrm{d}x_1,\cdots,\mathrm{d}x_m)^{\mathrm{T}},$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x}_N=(\mathrm{d}x_{m+1},\cdots,\mathrm{d}x_n)^{\mathrm{T}}.$$

为用 $\mathrm{d}\boldsymbol{x}_N$ 表示 $\mathrm{d}\boldsymbol{x}_B$,把约束微分,则有

$$\left.\begin{aligned}\mathrm{d}h_1&=\frac{\partial h_1}{\partial x_1}\mathrm{d}x_1+\cdots+\frac{\partial h_1}{\partial x_n}\mathrm{d}x_n=0,\\ \mathrm{d}h_2&=\frac{\partial h_2}{\partial x_1}\mathrm{d}x_1+\cdots+\frac{\partial h_2}{\partial x_n}\mathrm{d}x_n=0,\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\\ \mathrm{d}h_m&=\frac{\partial h_m}{\partial x_1}\mathrm{d}x_1+\cdots+\frac{\partial h_m}{\partial x_n}\mathrm{d}x_n=0.\end{aligned}\right\} \tag{3.14.29}$$

考虑到(3.14.24),则(3.14.29),即

$$\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_B}\mathrm{d}\boldsymbol{x}_B+\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_N}\mathrm{d}\boldsymbol{x}_N=\boldsymbol{0}. \tag{3.14.30}$$

由于$\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}_B}$可逆,有

$$dx_B = -\left(\frac{\partial h}{\partial x_B}\right)^{-1}\frac{\partial h}{\partial x_N}dx_N, \tag{3.14.31}$$

把 dx_B 代入(3.14.26),则

$$df = \left[\nabla_{x_N} f - \left(\left(\frac{\partial h}{\partial x_B}\right)^{-1}\frac{\partial h}{\partial x_N}\right)^T \nabla_{x_B} f\right]^T dx_N.$$

由此得到既约梯度

$$\begin{aligned} r(x_N) &= \frac{df}{dx_N} \\ &= \nabla_{x_N} f - \left[\left(\frac{\partial h}{\partial x_B}\right)^{-1}\frac{\partial h}{\partial x_N}\right]^T \nabla_{x_B} f. \end{aligned} \tag{3.14.32}$$

其中,所用记号为

$$\frac{df}{dx_N} = \left(\frac{df}{dx_{m+1}}, \cdots, \frac{df}{dx_n}\right)^T.$$

这样,给定一点 $x^{(k)}$,就能由(3.14.32)求出既约梯度,进而可以研究怎样确定搜索方向问题.现在,定义 $d_N^{(k)}$,使它的分量满足:

$$d_{N_j}^{(k)} = \begin{cases} 0, & \text{当 } x_{N_j}^{(k)} = l_{N_j} \text{ 且 } r_j(x_N^{(k)}) > 0 \text{ 或当 } x_{N_j}^{(k)} = u_{N_j} \text{ 且 } r_j(x_N^{(k)}) < 0, \\ -r_j(x_N^{(k)}), & \text{其他}. \end{cases} \tag{3.14.33}$$

其中,$d_{N_j}^{(k)}$ 是 $d_N^{(k)}$ 的第 j 个分量,$x_{N_j}^{(k)}$ 是 $x_N^{(k)}$ 的第 j 个分量,l_{N_j} 和 u_{N_j} 分别是非基本变量 x_{N_j} 的下界和上界.

由于 $h(x)=0$ 是非线性方程组,不能像线性约束那样求出 $d_B^{(k)}$ 的表达式.为从 $x^{(k)}$ 出发求出使目标函数值下降的可行点,在定义 $d_N^{(k)}$ 之后,取适当的步长 t,令

$$\hat{x}_N = x_N^{(k)} + t d_N^{(k)},$$

且使

$$l_N \leqslant \hat{x}_N \leqslant u_N.$$

再求解非线性方程组

$$h(y, \hat{x}_N) = 0, \tag{3.14.34}$$

得到 $\hat{y}$.若满足

$$f(\hat{y}, x_N^{(k)}) < f(x_B^{(k)}, x_N^{(k)}), \tag{3.14.35}$$

并且

$$l_B \leqslant \hat{y} \leqslant u_B, \tag{3.14.36}$$

则得到新的可行点 $(\hat{y}, x_N^{(k)})$;若 $\hat{y}$ 不满足(3.14.35)和(3.14.36),则减少步长 t,重复以上过程.

广义既约梯度法的算法步骤如下:

(1) 给定初始可行点 $x^{(1)}$,允许误差 $\epsilon_1, \epsilon_2 > 0$,正整数 J,令 $k=1$.

(2) 将 $x^{(k)}$ 分成基变量和非基变量:$(x_B^{(k)}, x_N^{(k)})$,由(3.14.32)计算既约梯度 $r(x_N)$,由(3.14.33)求得方向 $d_N^{(k)}$.

(3) 若 $\| d_N^{(k)} \| < \epsilon_1$,则停止计算,得到 $x^{(k)}$;否则,进行(4).

(4) 取 $t>0$,令

$$\hat{x}_N = x_N^{(k)} + t d_N^{(k)},$$

若 $l_N \leqslant \hat{x}_N \leqslant u_N$，则进行(5)；否则，以 $0.5t$ 代替 t，再求 $\hat{x}_N$，直至满足 $l_N \leqslant \hat{x}_N \leqslant u_N$，进行(5).

(5) 求解非线性方程组(3.14.34). 可用牛顿法求解：

令 $y^{(1)} = x_B^{(k)}$，$j=1$，进行以下步骤.

① 令

$$y^{(j+1)} = y^{(j)} - \left(\frac{\partial h(y^{(j)}, \hat{x}_N)}{\partial x_B}\right)^{-1} h(y^{(j)}, \hat{x}_N),$$

若 $f(y^{(j+1)}, \hat{x}_N) < f(x^{(k)})$，$l_B \leqslant y^{(j+1)} \leqslant u_B$，并且 $\| h(y^{(j+1)}, \hat{x}_N) \| < \varepsilon_2$，则转(6)；否则转(2).

② 若 $j=J$，则以 $0.5t$ 代替 t，令

$$\hat{x}_N = x_N^{(k)} + td_N^{(k)},$$
$$y^{(1)} = x_B^{(k)},$$

令 $j=1$，返回(1)；否则令 $j=j+1$，返回(1).

(6)令 $x^{(k+1)} = (y^{(j+1)}, \hat{x})$，令 $k=k+1$，返回(2).

为了减少计算量，在解非线性方程组时，可用 $\left(\frac{\partial h(x^{(k)})}{\partial x_B}\right)^{-1}$ 近似取代 $\left(\frac{\partial h(y^{(j)}, \hat{x}_N}{\partial x_B}\right)^{-1}$.

由于前者在求既约梯度时已经做了计算，并不增加额外的工作量.

既约梯度法是目前求解非线性规划问题的最有效的方法之一. 这种方法通过消去某些变量在降维空间中运算，能够较快确定最优解，可用来求解大型问题.

3.15 非线性规划程序求解

3.15.1 用 Matlab 解一元函数的无约束优化问题

设一元函数无约束优化问题为

$$\min \quad f(x),$$
$$x_1 \leqslant x \leqslant x_2.$$

常用格式如下：

(1) x = fminbnd(fun, x_1, x_2);

(2) x = fminbnd(fun, x_1, x_2, options);

(3) [x, fval] = fminbnd(…);

(4) [x, fval, exitflag] = fminbnd(…);

(5) [x, fval, exitflag, output] = fminbnd(…).

其中，(3)，(4)，(5)的等式右边可选用(1)或(2)的等式右边.

函数 fminbnd 的算法基于 0.618 法和二次插值法，它要求目标函数必须是连续函数，并可能只给出局部最优解.

例 3.21 对边长为 3m 的正方形铁板，在 4 个角剪去相等的正方形以制成方形无盖水槽，问如何剪法使水槽的容积最大？

解 设剪去的正方形边长为 x,则水槽的容积为$(3-2x)^2x$,建立无约束优化模型为

$$\min \quad y=-(3-2x)^2x,$$
$$0<x<1.5,$$

先编写 M 文件 fun1.m 如下:

```
fuction f=fun1(x)
f=-(3-2*x)^2*x
```

程序:

```
[x,fval]=fminbnd('fun1',0,1.5);
xmax=x
fmax=-fval
```

运算结果:

xmax=0.5000, fmax=2.0000.

即剪掉的正方形的边长为 0.5m 时水槽的容积最大,最大容积为 $2m^3$.

3.15.2 用 Matlab 解多元函数的无约束优化问题

设多元函数无约束优化问题标准形为

$$\min \quad f(x).$$

命令格式为

(1) x=fminunc(fun, x0)或 x=fminsearch(fun, x0);

(2) x=fminunc(fun, x0, options)或 x=fminsearch(fun, x0, options);

(3) [x, fval]=fminunc(…)或[x, fval]=fminsearch(…);

(4) [x, fval, exitflag]=fminunc(…)或[x, fval, exitflag]=fminsearch(…);

(5) [x, fval, exitflag, output]=fminunc(…)或[x, fval, exitflag, output]=fminsearch(…).

说明:fminsearch 是用单纯形法寻优.而对于 fminunc 的算法:

(1) fminunc 为无约束优化提供了大型优化和中型优化算法,由 options 中的参数 LargeScale 控制:

LargeScale='on'(默认值),使用大型算法;

LargeScale='off'(默认值),使用中型算法.

(2) fminunc 为中型优化算法的搜索方向提供了 4 种算法,由 options 中的参数 HessUpdate控制:

HessUpdate='bfgs'(默认值),拟牛顿法的 BFGS 公式;

HessUpdate='dfp',拟牛顿法的 DFP 公式;

HessUpdate='steepdesc',最速下降法.

(3)fminunc 为中型优化算法的步长一维搜索提供了两种算法,由 options 中参数 LineSearchType控制:

LineSearchType='quadcubic'(缺省值),混合的二次和三次多项式插值;

LineSearchType='cubicpoly',三次多项式插值.

例 3.22 产销量的最佳安排 某厂生产一种产品有甲、乙两个牌号,讨论在产销平衡的情况下如何确定各自的产量,使总利润最大.所谓产销平衡指工厂的产量等于市场上的销

量.

符号说明

$z(x_1, x_2)$表示总利润;

p_1, q_1, x_1 分别表示甲的价格、成本和销量;

p_2, q_2, x_2 分别表示乙的价格、成本和销量;

$a_{ij}, b_i, \lambda_i, c_i (i, j = 1, 2)$是待定系数.

基本假设

(1) 价格与销量成线性关系利润既取决于销量和价格,又依赖于产量和成本.按照市场规律,甲的价格 p_1 会随其销量 x_1 的增长而降低,同时乙的销量 x_2 的增长也会使甲的价格稍微下降,可以简单地假设价格与销量成线性关系,即

$$p_1 = b_1 - a_{11}x_1 - a_{12}x_2,\ b_1, a_{11}, a_{12} > 0 \text{ 且 } a_{11} > a_{12},$$

同理

$$p_2 = b_2 - a_{21}x_1 - a_{22}x_2,\ b_2, a_{21}, a_{22} > 0 \text{ 且 } a_{22} > a_{21}.$$

(2) 成本与产量成负指数关系,甲的成本随其产量的增长而降低,且有一个渐进值,可以假设为负指数关系,即

$$q_1 = r_1 e^{-\lambda_1 x_1},\ r_1 \lambda_1, c_1 > 0,$$

同理

$$q_2 = r_2 e^{-\lambda_2 x_2},\ r_2 \lambda_2, c_2 > 0,$$

模型的建立

总利润为 $$z(x_1, x_2) = (p_1 - q_1)x_1 + (p_2 - q_2)x_2.$$

若根据大量的统计数据,求出系数

$$b_1 = 100, a_{11} = 1, a_{12} = 0.1,$$

$$b_2 = 280, a_{21} = 0.2, a_{22} = 2,$$

$$r_1 = 30, \lambda_1 = 0.015, c_1 = 20,$$

$$r_2 = 100, \lambda_2 = 0.02, c_2 = 30,$$

则问题转化为无约束优化问题:求甲、乙两个牌号的产量 x_1, x_2,使总利润 z 最大.为简化模型,先忽略成本,并令 $a_{12} = 0, a_{21} = 0$,问题转化为求

$$z = (b_1 - a_{11}x_1)x_1 + (b_2 - a_{22}x_2)x_2$$

的极值.把(50,70)作为原问题的初始值.

模型求解

编写 M-文件 fun.m:

```
Function f = fun2(x)
y1 = ((100 - x(1) - 0.1 * x(2)) - (30 * exp( - 0.015 * x(1)) + 20)) * x(1);
y2 = ((280 - 0.2 * x(1) - 2 * x(2)) - (100 * exp( - 0.02 * x(2)) + 30)) * x(2);
f = - y1 - y2;
```

主程序:

```
x0 = [50,70];    x = fminunc('fun2', x0),    z = fun(x)
```

运算结果:

$$x = 23.9025, 62.4977, z = 6.4135e+003,$$

即甲的产量为 23.9025,乙的产量为 62.4977,最大利润为 6413.5.

3.15.3 用 Matlab 解约束优化问题

一般非线性规划标准形为：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leqslant \boldsymbol{b}, \\
& Aeq \cdot \boldsymbol{x} = beq, \\
& G(\boldsymbol{x}) \leqslant 0, \\
& Ceq(\boldsymbol{x}) = 0, \\
& VLB \leqslant \boldsymbol{x} \leqslant VUB.
\end{aligned}
$$

其中，x 为 n 维向量，$G(x)$与 $Ceq(x)$均为非线性函数组成的向量.

用 Matlab 求解上述问题，基本步骤为：

(1) 首先建立 M 文件 fun.m，定义目标函数 f(x)：

```
function f=fun3(x);
f=f(x);
```

若约束条件中有非线性约束：G(x)≤0 或 Ceq(x)=0，则建立 M 文件 nonlcon.m.

(2) 定义函数 G(x)与 Ceq(x)：

```
function[G, Ceq] = nonlcon(x)
G=…
Ceq=…
```

(3) 建立主程序，非线性规划求解的函数是 fmincon，命令的基本格式如下：

① x=fmincon(fun, x0, A, b);

② x=fmincon(fun, x0, A, b, Aeq, Beq);

③ x=fmincon(fun, x0, A, b, Aeq, Beq, VLB, VUB);

④ x=fmincon(fun, x0, A, b, Aeq, Beq, VLB, VUB, nonlcon);

⑤ x=fmincon(fun, x0, A, b, Aeq, Beq, VLB, VUB, nonlcon, options);

⑥ [x, fval]=fmincon(…);

⑦ [x, fval, exitflag]=fmincon(…);

⑧ [x, fval, exitflag, output]=fmincon(…).

说明：

① fmincon 函数提供了大型优化算法和中型优化算法.默认时，若在 fun 函数中提供了梯度，并且只有上下界存在或只有等式约束，fmincon 函数选择大型算法.当既有等式约束又有梯度约束时，使用中型算法.

② fmincon 函数的中型算法使用的是序列二次规划法.在每一步迭代中求解二次规划子问题，并用 BFGS 法更新 Hessian 矩阵.

③ fmincon 函数可能会给出局部最优解，这与初值的选取有关.

例 3.23

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f = -x_1 - 2x_2 + \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2, \\
\text{s.t.} \quad & 2x_1 + 3x_2 \leqslant 6, \\
& x_1 + 4x_2 \leqslant 5, \\
& x_1, x_2 \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

解 建立 M-文件 fun3.m：

```
function f=fun3(x);
f=-x(1)-2*x(2)+(1/2)*x(1)^2+(1/2)*x(2)^2;
```

建立主程序：

```
x0=[1;1];
A=[2 3;1 4]; b=[6;5];
Aeq=[];beq=[];
VLB=[0;0];VUB=[];
[x,fval]=fmincon(fun3,x0,A,b,Aeq,Beq,VLB,VUB)
```

运算结果为：

```
x=0.7647
  1.0588
fval=-2.0294
```

例 3.24

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x)=-2x_1-x_2,\\ \text{s.t.}\quad & g_1(x)=25x_1^2+x_2^2-25\leqslant 0,\\ & g_2(x)=\quad x_1^2+x_2^2-7\geqslant 0,\\ & 0\leqslant x_1\leqslant 5,\quad 0\leqslant x_2\leqslant 10.\end{aligned}$$

先建立 M-文件 fun.m 定义目标函数：

```
function f=fun(x);
f=-2*x(1)-x(2);
```

再建立 M 文件 mycon1.m 定义非线性约束：

```
function[g,Ceq]=mycon1(x)
g=[x(1)^2+x(2)^2-25;x(1)^2-x(2)^2-7];
```

主程序为：

```
x0 =[3;2.5];
VLB=[0 0];VUB=[5 10];
[x,fval,exitflag,output]=fmincon('fun',x0,[],[],[],[],VLB,VUB,'mycon1')
```

运算结果为：

```
x =
  4.0000
  3.0000
  fval=-11.0000
  exitflag=1
  output =
        iterations:4
        funcCount:17
        stepsize:1
        algorithm:[1x44 char]
```

firstorderopt:[ ]

cgiterations:[ ]

习　题

1. 证明 $f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x$ 为严格凸函数的充要条件是 Hessian 矩阵 A 正定.

2. 考虑非线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & (x_1-3)^2+(x_2-2)^2,\\ \text{s.t.}\quad & x_1^2+x_2^2\leqslant 5,\\ & x_1+2x_2=4,\\ & x_1,\quad x_2\geqslant 0.\end{aligned}$$

检验 $\bar{x}=(2,1)^{\mathrm{T}}$ 是否为 K-T 点.

3. 考虑下列非线性规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & \frac{1}{2}((x_1-1)^2+x_2^2),\\ \text{s.t.}\quad & -x_1+\beta x_2^2=0.\end{aligned}$$

讨论 β 取何值时, $\bar{x}=(0,0)^{\mathrm{T}}$ 是局部最优解?

4. 给定非线性规划问题:

$$\begin{aligned}\max\quad & b^{\mathrm{T}}x,\\ & x\in E^n,\\ \text{s.t.}\quad & x^{\mathrm{T}}x\leqslant 1.\end{aligned}$$

其中, $b\neq 0$. 证明向量 $\bar{x}=b/\|b\|$ 满足最优性的充分条件.

5. 考虑下列问题:

$$\min\quad 3x^4-4x^3-12x^2,$$

(1) 用牛顿法迭代 3 次, 取初始点 $x^{(0)}=-1.2$;

(2) 用割线法迭代 3 次, 取初始点 $x^{(1)}=-1.2, x^{(2)}=-0.8$;

(3) 用抛物线法迭代 3 次, 取初始点 $x^{(1)}=-1.2, x^{(2)}=-1.1, x^{(3)}=-0.8$.

6. 给定函数

$$f(x)=(6+x_1+x_2)^2+(2-3x_1-3x_2-x_1x_2)^2,$$

求在点

$$\hat{x}=\begin{pmatrix}-4\\ 6\end{pmatrix}$$

处的牛顿方向和最速下降方向.

7. 用最速下降法求解下列问题:

$$\min\quad x_1^2-2x_1x_2+4x_2^2+x_1-3x_2,$$

取初始点 $x^{(1)}=(1,1)^{\mathrm{T}}$, 迭代两次.

8. 设有函数

$$f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x+c,$$

其中, A 为对称正定矩阵. 又设 $x^{(1)}(\neq\bar{x})$, 可表示为

$$x^{(1)}=\bar{x}+\mu p,$$

其中, $\bar{x}$ 是 $f(x)$ 的极小点, p 是 A 的属于特征值 λ 的特征向量. 证明:

(1) $\nabla f(x^{(1)})=\mu\lambda p$;

(2) 如果从 $x^{(1)}$ 出发, 沿最速下降方向作精确的一维搜索, 则一步达到极小点 $\bar{x}$.

9. 用共轭梯度法求解问题

(1) $$\min \quad x_1^2+2x_2^2-2x_1x_2+2x_2+2,$$
取初始点 $x^{(1)}=(0,0)^T$；

(2) $$\min \quad 2x_1^2+2x_1x_2+5x_2^2,$$
取初始点 $x^{(1)}=(2,-2)^T$.

10. 设有非线性规划问题

$$\min \quad \frac{1}{2}x^T Ax,$$
$$\text{s.t.} \quad x \geqslant b.$$

其中，A 为 n 阶对称正定矩阵. 设 $\bar{x}$ 是问题的最优解. 证明 $\bar{x}$ 与 $\bar{x}-b$ 关于 A 共轭.

11. 用 DFP 方法求解问题

$$\min \quad x_1^2+3x_2^2,$$

取初始点及初始矩阵为

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}, H_1=\begin{pmatrix}2 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}.$$

12. 用单纯形法解非线性问题

$$\min \quad 4(x_1-5)^2+(x_2-6)^2,$$

取初始单纯形顶点

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}8\\9\end{pmatrix}, \quad x^{(2)}=\begin{pmatrix}10\\11\end{pmatrix}, \quad x^{(3)}=\begin{pmatrix}8\\11\end{pmatrix},$$

取因子 $\alpha=2, \gamma=1, \beta=\frac{1}{2}$. 要求迭代 4 次.

13. 试用障碍函数法(内点法)求解

$$\min \quad f(x)=5x_1^2+x_2^2,$$
$$\text{s.t.} \quad x_1 \geqslant 1, x_2 \geqslant 0.$$

14. 试用混合函数法求解

$$\min \quad f(x)=x_1^2+x_2^2,$$
$$\text{s.t.} \quad x_1+x_2=4,$$
$$(x_1-4)^2+x_2^2 \leqslant 2.$$

15. 用 Zoutendijk 方法求解问题

(1) $\min \quad x_1^2+4x_2^2-34x_1-32x_2,$

s.t. $2x_1+x_2 \leqslant 6,$

$x_2 \leqslant 2,$

$x_1, \ x_2 \geqslant 0.$

取初始点 $x^{(1)}=(1,2)^T$.

(2) $\min \quad x_1^2+2x_2^2+3x_3^2+x_1x_2-2x_1x_3+x_2x_3-4x_1-6x_2,$

s.t. $x_1+2x_2+x_3 \leqslant 4,$

$x_1, \ x_2, \ x_3 \geqslant 0.$

取初始点 $x^{(1)}=(0,0,0)^T$.

16. 用梯度投影求解问题

(1) $\min \quad (4-x_2)(x_1-3)^2,$

s.t. $x_1+x_2 \leqslant 3,$

$x_1 \leqslant 2,$

$x_2 \leqslant 2,$

$x_1, \ x_2 \geqslant 0.$

取初始点 $x^{(1)}=(1,2)^{\mathrm{T}}$.

(2) $$\begin{aligned}\min\quad & x_1^2+x_2^2+2x_2+5,\\ \text{s.t.}\quad & x_1-2x_2\geqslant 0,\\ & x_1,\quad x_2\geqslant 0.\end{aligned}$$

取初始点 $x^{(1)}=(2,0)^{\mathrm{T}}$.

(3) $$\begin{aligned}\min\quad & x_1^2+x_1x_2+2x_2^2-6x_1-2x_2-12x_3,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2+x_3=2,\\ & x_1-2x_2\geqslant -3,\\ & x_1,\quad x_2,\quad x_3\geqslant 0.\end{aligned}$$

取初始点 $x^{(1)}=(1,0,1)^{\mathrm{T}}$.

17. 用既约梯度法求解问题

$$\begin{aligned}\min\quad & 2x_1^2+2x_2^2-2x_1x_2-4x_1-6x_2,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2+x_3=2,\\ & x_1+5x_2+x_4=5,\\ & x_j\geqslant 0,\quad j=1,\cdots,4.\end{aligned}$$

取初始点 $x^{(1)}=(1,0,1,4)^{\mathrm{T}}$.

18. 考虑下列问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x),\\ \text{s.t.}\quad & g_i(x)\geqslant 0,\quad i=1,\cdots,m,\\ & h_j(x)=0,\quad j=1,\cdots,l.\end{aligned}$$

设 $\hat{x}$ 是可行点,$I=\{i\mid g_i(\hat{x})=0\}$. 证明 $\hat{x}$ 为 K-T 点的充要条件是下列问题的目标函数的最优值为零:

$$\begin{aligned}\min\quad & \nabla f(\hat{x})^{\mathrm{T}}d.\\ \text{s.t.}\quad & \nabla g_i(\hat{x})^{\mathrm{T}}d\geqslant 0,\quad i=1\in I,\\ & \nabla h_j(\hat{x})^{\mathrm{T}}d=0,\quad j=1,\cdots,l,\\ & -1\leqslant d_j\leqslant 1,\quad j=1,\cdots,n.\end{aligned}$$

第4章 整数规划

整数规划(Integer Programming，简记为 IP)是一类要求决策变量取整数值的数学规划，若线性规划中的变量要求取整数值时，则称其为整数线性规划；若非线性规划中的变量要求取整数值时，则称其为整数非线性规划.

在现实生活中，许多约束优化问题往往要求最优解是整数解，例如第 2 章所讲到的合理下料问题，就要求下料的根数是整数. 再如，人员的指派问题、大型设备运输及使用、航空港的管制问题等，都需要求出整数的最优解.

4.1 整数规划的数学模型

例 4.1 某航运公司有一艘载重量为 a 的货船，有 n 种货物可供载运. 已知第 j 种货物每件质量为 b_j，装载收费为 c_j. 试问怎样装载，才使航运公司的收益最大？试建立数学模型.

解 令 x_j 表示该船所装载的第 j 种货物的件数，显然 x_j 应是非负整数，于是可得其数学模型为

$$\max \quad Z = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j,$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^{n} b_j x_j \leqslant a,$$

$$x_j \text{ 为非负整数}, \quad j = 1, 2, \cdots, n.$$

在现实生活中，船舶装载问题不像例 4.1 这样简单. 相对而言，质量约束的问题较易处理，而货仓容积的约束问题要难处理一些，除了要考虑货舱容积及各种货物每件体积的数量关系，还要考虑其形状及堆放方式，类似一个三维的合理下料问题，其求解的难度是很大的.

在例 4.1 中所得到的模型，要求所有的变量都是整数，称这类模型为纯整数的线性规划问题，其一般形式为

$$\max \quad Z = \boldsymbol{c}\boldsymbol{x},$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},$$

$$\boldsymbol{x} \text{ 为整数向量}.$$

另一方面，如果只对部分变量有整数要求，则称之为混合整数线性规划，其模型的一般形式为

$$\max \quad Z = \boldsymbol{c}_1\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{c}_2\boldsymbol{x}_2,$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{b},$$

$$\boldsymbol{x}_1 \geqslant \boldsymbol{0}, \ \boldsymbol{x}_2 \text{ 为非负整数}.$$

其中，c_1, c_2, x_1, x_2 均为向量.

例 4.2 某市有 5 项工程可考虑立项施工，每项工程的建设时间均为 3 年，每年所需的投资额及建成后收益见表 4.1. 根据市政规划，要求 1，2 两项中至少要建设 1 项，在后 3 项中最多建设 2 项. 问应上哪些项目，才使总收益最大？试建立数学模型.

表 4.1

工程序号	各年度投资			收　益
	第一年	第二年	第三年	
1	3	1	8	20
2	4	7	10	32
3	6	4	3	25
4	7	10	5	40
5	1	5	4	18
可用资金	15	20	25	

解 本问题是要决定某项工程是否立项建设，可用一个二值变量的两种不同取值来代表建设及不建设两种不同的状态，令

$$x_j = \begin{cases} 1, & \text{当且仅当工程 } j \text{ 动工建设,} \\ 0, & \text{当且仅当工程 } j \text{ 不动工建设,} \end{cases} \quad j = 1,2,3,4,5.$$

设工程 j 的利润值为 z_j，则由表 4.1，有

$$z_1 = \begin{cases} 20, & \text{当且仅当工程 1 动工建设,} \\ 0, & \text{当且仅当工程 1 不动工建设.} \end{cases}$$

注意到变量 x_1 的定义，可推知

$$z_1 = 20x_1,$$

类似可推知

$$z_2 = 32x_2,\ z_3 = 25x_3,\ z_4 = 40x_4,\ z_5 = 18x_5.$$

约束条件有三类：第一类是每年可动用的资金数额的约束；第二类是由于市政规划所限定的施工项目与数量的约束；第三类是变量特性的约束. 于是本问题的数学模型如下.

目标函数：

$$\max \quad Z = 20x_1 + 32x_2 + 25x_3 + 40x_4 + 18x_5,$$

年度资金约束：

$$3x_1 + 4x_2 + 6x_3 + 7x_4 + x_5 \leqslant 15,$$
$$x_1 + 7x_2 + 4x_3 + 10x_4 + 5x_5 \leqslant 20,$$
$$8x_1 + 10x_2 + 3x_3 + 5x_4 + 4x_5 \leqslant 25,$$

施工项目与数量约束：

$$x_1 + x_2 \geqslant 1,$$
$$x_3 + x_4 + x_5 \leqslant 2,$$

变量特性约束：

$$x_j = 0, 1, \quad j = 1,2,3,4,5.$$

在例 4.2 中，一个显著的特点是变量仅取 0，1 两个值，称这种问题为 0-1 规划.

4.2 割平面法

割平面法(cutting plane method)是1963年由R.E.Gomory首先提出的．从此以后，整数规划逐渐成为一个独立的运筹学分支，由于用割平面法解整数规划问题常常会遇到收敛很慢的情况，所以完全用它来求解整数规划问题的仍然不多，但它在理论上是很重要的，被看作整数规划的核心部分．

割平面法的基本原理非常直观．首先在欲求解的整数规划问题中暂不考虑变量为整数的要求，得到原问题的松弛问题．显然，原问题的所有可行解全部包含在其松弛问题的可行解中．然后，用常规的办法求解松弛问题，如果所得的最优解正好满足变量的整数要求，显然该松弛问题的最优解必是原问题的最优解；如果所得松弛问题的最优解不满足整数要求，则设法在松弛问题中加入一个约束条件，其作用是把松弛问题的可行域割去一块．如果这个约束构造得当，可以只割去非整数点，使原问题的全部可行解仍然保留在松弛问题剩下的可行域中，然后再对所得的新问题求解，若所得最优解是符合原问题要求的整数解，则得到原问题的最优解；否则，再构造约束来切割松弛问题剩下的可行域，直到获得原问题的最优解．

4.2.1 纯整数线性规划的情形

设原问题是纯整数线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = \boldsymbol{cx}, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x}\text{ 为整数向量}. \end{aligned}$$

其松弛问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = \boldsymbol{cx}, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{x} \geqslant \boldsymbol{0}. \end{aligned}$$

用单纯形法对其松弛问题求解，得到最优解单纯形表．设在最优表中，基变量为 $x_1, x_2, \cdots, x_m$，非基变量为 $x_{m+1}, x_{m+2}, \cdots, x_n$，且最优解中，基变量 x_i 的取值 b'_i 是分数，不满足整数解的要求．由单纯形表的迭代过程可知，单纯形表第 i 行的数据代表的方程为

$$x_i + \sum_{j=m+1}^{n} a'_{ij} x_j = b'_i, \tag{4.2.1}$$

把 b'_i 及 a'_{ij} 分别分解为两部分：

$$\left.\begin{aligned} b'_i &= N_i + f_i, \\ a'_{ij} &= N_{ij} + f_{ij},\ j = m+1, m+2, \cdots, n. \end{aligned}\right\} \tag{4.2.2}$$

其中，N_i, N_{ij} 是整数，$0 < f_i < 1$，$0 < f_{ij} < 1$，$j = m+1, m+2, \cdots, n$.

将上述分解结果代入(4.2.1)，经过移项整理，可得

$$f_i - \sum_{j=m+1}^{n} f_{ij} x_j = x_i - N_i + \sum_{j=m+1}^{n} N_{ij} x_j. \tag{4.2.3}$$

显然，当变量全部是整数时，(4.2.3)的右端的计算结果必是整数，因而(4.2.3)的左端也必然等于整数．

注意到 $f_{ij}>0$，$x_j\geqslant 0$，故

$$f_i-\sum_{j=m+1}^{n}f_{ij}x_j<f_i<1. \tag{4.2.4}$$

由于(4.2.3)左端是整数，由(4.2.4)，可知应是小于 1 的整数，有

$$f_i-\sum_{j=m+1}^{n}f_{ij}x_j\leqslant 0. \tag{4.2.5}$$

由推导过程可知，(4.2.5)是所有变量为整数的必要条件．称之为 Gomory 约束．显然，把 Gomory 约束加入到松弛问题的约束条件中之后，松弛问题的可行域就被割去一块．由于原问题必须满足 Gomory 约束，因而被割去的部分(即不满足 Gomory 约束的点)只能是非整数点．

在实际计算中，为了尽快得到整数解，需要将(4.2.5)的两边同乘以 f_i 的分母，并引入非负松弛变量 y 将(4.2.5)化为(4.2.6)，有

$$-\sum_{j=m+1}^{n}f'_{ij}x_j+y=-f'_i. \tag{4.2.6}$$

其中，f'_i 是整数，$y\geqslant 0$．

然后把(4.2.6)加入到松弛问题的最优单纯形表中，利用对偶单纯形法进行求解．若得到整数最优解，计算停止；否则，应根据新的最优单纯形表再构造 Gomory 约束，求解，直至终结．

例 4.3 试用 Gomory 割平面法求解

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=-x_1-x_2,\\ \text{s.t.}\quad & -x_1+x_2\leqslant 1,\\ & 3x_1+x_2\leqslant 4,\\ & x_1,\ x_2\geqslant 0,\ x_1,x_2\ \text{是整数}.\end{aligned}$$

解 将原问题的松弛问题标准化，得

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=-x_1-x_2,\\ \text{s.t.}\quad & -x_1+x_2+x_3=1,\\ & 3x_1+x_2+x_4=4,\\ & x_1,\ x_2,\ x_3,x_4\geqslant 0.\end{aligned}$$

用单纯形法求解此松弛问题，所得最优单纯形表见表 4.2，显然，松弛问题的最优解不是整数解．

从表 4.2 中任取一行，现选取第一行，可得方程：

$$x_1-\frac{1}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4=\frac{3}{4},$$

将各个系数分解为正真分数与整数之和，有

$$-\frac{1}{4}=-1+\frac{3}{4},\ \frac{1}{4}=0+\frac{1}{4},\ \frac{3}{4}=0+\frac{3}{4},$$

所得 Gomory 约束为

$$\frac{3}{4}-\left(\frac{3}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4\right)\leqslant 0,$$

即

$$-3x_3-x_4\leqslant -3.$$

引入非负松弛变量 x_5，得

$$-3x_3-x_4+x_5=-3.$$

将此约束加入到表 4.2 中，得到表 4.3. 用对偶单纯形法对表 4.3 进行迭代求解，可得最优单纯形表 4.4. 由表 4.4 可以看出，所得最优解已是整数解，计算停止. 原问题的最优解及最优值为

$$\boldsymbol{x}^*=(1,1,1,0)^{\mathrm{T}},$$
$$Z^*=-2.$$

表 4.2

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1	0	-1/4	1/4	3/4
0	1	3/4	1/4	7/4
0	0	1/2	1/2	5/2

表 4.3

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
1	0	-1/4	1/4	0	3/4
0	1	3/4	1/4	0	7/4
0	0	(-3)	-1	1	-3
0	0	1/2	1/2	0	5/2

表 4.4

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
1	0	0	1/3	1/12	1
0	1	0	0	1/4	1
0	0	1	1/3	-1/3	1
0	0	0	1/3	1/6	2

下面给出例 4.3 中所得 Gomory 约束的几何解释.

Gomory 约束为

$$-3x_3-x_4\leqslant-3. \qquad (*)$$

注意到在松弛问题标准化后有

$$-x_1+x_2+x_3\qquad=1,$$
$$3x_1+x_2+\qquad x_4=4,$$

即

$$x_3=1+\ x_1-x_2,$$
$$x_4=4-3x_1-x_2.$$

代入式($*$)，Gomory 约束化为 $x_2\leqslant1$.

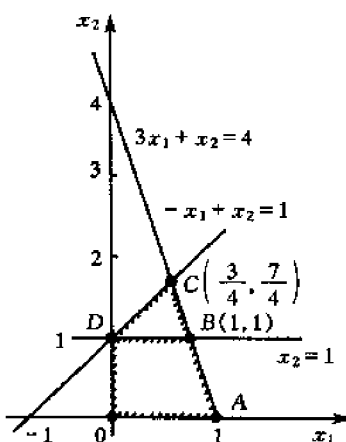


图 4.1

图 4.1 展示了松弛问题的求解及加入 Gomory 约束后的最优解．图中，以点 0，A，C，D 为顶点的四边形是松弛问题可行域，$C(3/4,\ 7/4)$ 是松弛问题最优解. 加入 Gomory 约束后，剩下可行域为以点 0，A，B，D 为顶点的梯形，最优解为

$B(1,1)$，已得原问题的最优解.

4.2.2 混合整数线性规划的情形

对于混合整数线性规划问题，在求解松弛问题时，设最优解为

$$x^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_m^*, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}} = (b'_1, b'_2, \cdots, b'_m, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}.$$

如果原问题要求基变量 x_i 为整数，但最优解中的 b'_i 为非整数，可按如下方法引入Gomory割平面约束.

设松弛问题的最优表第 i 行的数据代表方程：

$$x_i + \sum_{j=m+1}^{n} a'_{ij}x_j = b'_i.$$

其中，x_i 为基变量，b'_i 是分数，对 b'_i，a'_{ij}进行分解，使

$$\begin{cases} b'_i = N_i + f_i, \\ a'_{ij} = N_{ij} + f_{ij}. \end{cases}$$

其中，N_i，N_{ij}是整数，$0<f_i<1$，$0<f_{ij}<1$.

则对应的 Gomory 约束为

$$-\sum_{j=m+1}^{n} \lambda_j x_j + x_{n+1} = -f_i. \tag{4.2.7}$$

(4.2.7)中的 λ_j 按如下方式确定.

(1) 当 x_j 不是整数变量时，有

$$\lambda_j = \begin{cases} a'_{ij}, & a'_{ij} \geqslant 0, \\ \dfrac{f_i}{f_i - 1} a'_{ij}, & a'_{ij} < 0; \end{cases} \tag{4.2.8}$$

(2) 当 x_j 是整数变量时，有

$$\lambda_j = \begin{cases} f_{ij}, & f_{ij} \leqslant f_i, \\ \dfrac{f_i}{1 - f_i}(1 - f_{ij}), & f_{ij} > f_i. \end{cases} \tag{4.2.9}$$

例 4.4 用 Gomory 割平面法求解混合整数规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = -7x_1 - 9x_2, \\ \text{s.t.} \quad & -x_1 + 3x_2 + x_3 = 6, \\ & 7x_1 + x_2 + x_4 = 35, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3,4, x_1 \text{ 是整数}. \end{aligned}$$

解 原问题标准化后得到的松弛问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & Z = -7x_1 - 9x_2, \\ \text{s.t.} \quad & -x_1 + 3x_2 + x_3 = 6, \\ & 7x_1 + x_2 + x_4 = 35, \\ & x_j \geqslant 0, \quad j = 1,2,3,4. \end{aligned}$$

用单纯形法对松弛问题求解，所得最优单纯形表见表 4.5. 可知在松弛问题最优解中，不满足整数要求，应引入 Gomory 割平面约束.

表 4.5

x_1	x_2	x_3	x_4	b
0	1	7/22	1/22	7/2
1	0	-1/22	3/22	9/2
0	0	56/22	30/22	63

表 4.5 的第 2 行代表方程

$$x_1-\frac{1}{22}x_3+\frac{3}{22}x_4=\frac{9}{2},$$

其中，非基变量 x_3, x_4 均不要求是整数变量. 令

$$b'_2=\frac{9}{2}=4+\frac{1}{2},$$

由(4.2.7)，(4.2.8)，可引入 Gomory 约束：

$$-\left[\frac{0.5}{0.5-1}\left(-\frac{1}{22}\right)x_3+\frac{3}{22}x_4\right]+x_5=-\frac{1}{2},$$

即

$$-\frac{1}{22}x_3-\frac{3}{22}x_4+x_5=-\frac{1}{2},$$

加入到表 4.5 中，得表 4.6.

表 4.6

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	1	7/22	1/2	0	7/2
1	0	-1/22	3/22	0	9/2
0	0	-1/22	(-3/22)	1	-1/2
0	0	56/22	30/22	0	63

用对偶单纯形法迭代，可得最优表 4.7.

表 4.7

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	1	4/22	0	1/3	10/3
1	0	-2/22	0	1	4
0	0	1/3	1	-22/3	11/3
0	0	46/22	0	10	58

在表 4.7 中，整数变量 x_1 的取值为 4，已满足要求，所以，原问题的最优解及最优值为

$$x^*=(4,\ 10/3,\ 0,\ 11/3),\ Z^*=-58.$$

4.3 分枝估界法

分枝估界法(branch-and-bound method)的基本原理是：首先，求解原问题的松弛问题. 若得到符合要求的整数解，即为原问题的最优解，计算停止；否则，将松弛问题的可行域分割成几个不相交的子集，去掉一部分不满足要求的非整数解，而原问题的可行解全部保

留在各子集中．然后，分别求原目标函数在各个子集上的最优值，并比较各子集上的最优解的目标函数值的大小，若其中最好的一个目标值所对应的点正好是满足要求的整数点，则得到原问题的最优解，计算停止；否则，应对非整数最优解所在的子集再次进行分解，直至得到符合条件的整数最优解．

下面用实例来具体说明上述原理及分解可行域的方法．

例 4.5 用分枝估界法求解纯整数线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z=-3x_1-2x_2, \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1+3x_2\leqslant 14, \\ & 2x_1+x_2\leqslant 9, \\ & x_1,\ x_2\geqslant 0,\quad x_1,\ x_2\ \text{为整数}. \end{aligned}$$

解 去掉原问题的整数要求，引入松弛变量 x_3，x_4，得标准化的松弛问题 P_0，即

$$\begin{aligned} P_0:\ \min \quad & Z=-3x_1-2x_2, \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1+3x_2+x_3=14, \\ & 2x_1+x_2+x_4=9, \\ & x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4\geqslant 0, \end{aligned}$$

为使表达式简洁，记松弛问题 P_0 的可行域为 D_0．

用单纯形法对 P_0 求解，其最优单纯形表见表 4.8．可知，松弛问题 P_0 的最优解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 及最优值 $Z^{(0)}$ 为

$$\boldsymbol{x}^{(0)}=\begin{pmatrix}\frac{13}{4} & \frac{5}{2}\end{pmatrix},\quad Z^{(0)}=-\frac{59}{4}.$$

表 4.8

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1	0	−1/4	3/4	13/4
0	1	1/2	−1/2	5/2
0	0	1/4	5/4	59/4

由于 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 中，$x_1=\frac{13}{4}$，可在此附近将 D_0 分解成两个子集．分别引入两个约束：$x_1\leqslant 3$ 和 $x_1\geqslant 4$，得两个子问题 P_1，P_2，即

子问题 P_1：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z=-3x_1-2x_2, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x}\in D_0, \\ & x_1\leqslant 3; \end{aligned}$$

子问题 P_2：

$$\begin{aligned} \min \quad & Z=-3x_1-2x_2, \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x}\in D_0 \\ & x_1\geqslant 4. \end{aligned}$$

用单纯形法分别对子问题 P_1，P_2 求解．子问题 P_1，P_2 的最优单纯形表分别见表 4.9 和表 4.10．

表 4.9

x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	b
1	0	0	0	1	3
0	1	1/3	0	−2/3	8/3
0	0	−1/3	1	−4/3	1/3
0	0	2/3	0	5/3	43/3

表 4.10

x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	b
1	0	0	0	-1	4
0	1	0	1	1	1
0	0	1	-3	-4	3
0	0	0	2	1	14

由表 4.9 知，子问题 P_1 的最优解 $x^{(1)}$及最优值 $Z^{(1)}$为

$$x^{(1)}=(3,\ 8/3),$$

$$Z^{(1)}=-43/3=-14.33.$$

由表 4.10 知，子问题 P_2 的最优解 $x^{(2)}$及最优值 $Z^{(2)}$为

$$x^{(2)}=(4,1),\ Z^{(2)}=-14.$$

子问题 P_2 的最优解为整数解，符合要求，故 P_2 不再分解. 子问题 P_1 的最优解不是整数解，且 $Z^{(1)}<Z^{(2)}$，表明 P_1 中有可能存在优于 $x^{(2)}$的整数可行解，故应对 P_1 再进行分解. 分别关于 x_2 引入约束之后，可将 P_1 分解为 P_3，P_4 两个子问题，即

子问题 P_3：

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=-3x_1-2x_2,\\ \text{s.t.}\quad & x\in D_0,\\ & x_1\leqslant 3,\\ & x_2\leqslant 2.\end{aligned}$$

子问题 P_4：

$$\begin{aligned}\min\quad & Z=-3x_1-2x_2,\\ \text{s.t.}\quad & x\in D_0,\\ & x_1\leqslant 3,\\ & x_2\geqslant 3.\end{aligned}$$

经过计算，P_3 的最优解 $x^{(3)}$及最优值 $Z^{(3)}$为

$$x^{(3)}=(3,2),\quad Z^{(3)}=-13.$$

子问题 P_4 的最优解 $x^{(4)}$及最优值 $Z^{(4)}$为

$$x^{(4)}=(5/2,3),\quad Z^{(4)}=-27/2.$$

由于 $x^{(3)}$已是整数解，且 $Z^{(3)}>Z^{(2)}$，故 P_3 不再分解；$x^{(4)}$虽然不是整数解，但 $Z^{(4)}>Z^{(2)}$，表明 P_4 中也不可能存在优于 $x^{(2)}$的整数解，不必再分解. 这样，分解停止，原问题的最优解为

$$x^*=x^{(2)}=(4,1),\quad Z^*=Z^{(2)}=-14.$$

图 4.2 表明了各子问题 P_j 以及相应的最优解 $x^{(j)}$.

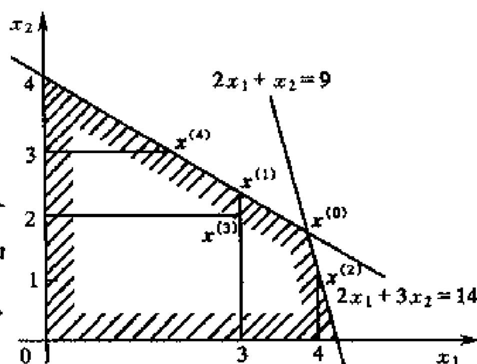


图 4.2

4.4 隐枚举法

隐枚举法是求解 0-1 规划常用的一种方法. 对于有 n 个变量的 0-1 规划问题，由于每个变量只取 0，1 两个值，故 n 个变量所有可能的组合数有 2^n 个. 若对这 2^n 个组合点逐点检查可行性，并算出每个可行点上的目标函数值，再比较其大小，就可求得最优解和最优值，这种方法称为完全枚举法(或穷举法). 完全枚举法只适用于变量个数较少的 0-1 规划问题，当 n 很大时，计算量相当大. 因此，应寻找适当的方法来减少工作量，以求迅速找到最优解.

方法之一是设置目标函数的过滤值，其基本原理是：对于当前欲检验的点，如果其目标函数值比已知的某个可行点的目标值差，那么没有必要检验这个当前点是否为可行点．也就是说，事先找到一个可行点，以其目标函数值作为过滤值，对其他未检验的点，首先，计算其目标函数值，若比过滤值差，则不再检验其可行性．若目标函数值优于过滤值，则进一步检验其可行性，若不是可行点，则放弃该点；若是可行点，则记下该点为当前最优点，并以其目标函数值作为新的过滤值．然后，对其他未检验点进行检验．这样，就可以减少大量的运算．

方法之二是对原问题的目标函数(尤其是当目标函数是线性函数时，效果更好)及约束条件进行适当的调整处理，指出目标函数值增大(或减少)的规律，以减少工作量．下面以求解极大化的 0-1 线性规划为例说明处理的基本方法．

(1) 将目标函数的各项按变量系数递增的次序重新排列．如设原目标函数为

$$\max \quad Z=3x_1+x_2+2x_3+8x_4,$$

则改记为

$$\max \quad Z=x_2+2x_3+3x_1+8x_4.$$

(2) 将各约束条件的变量按调整后的次序重新排列．例如，原约束条件有两个：

$$\begin{aligned}\text{s.t.}\quad & x_1+2x_2-8x_3+x_4\leqslant 10\\ & 2x_1-x_2+x_3+3x_4=6,\end{aligned}$$

则调整为

$$\begin{aligned}\text{s.t.}\quad & 2x_2-8x_3+x_1+x_4\leqslant 10,\\ & -x_2+x_3+2x_1+3x_4=6.\end{aligned}$$

(3) 将各约束编号后列表，并任取一个可行点的目标值作为初始过滤值，记为 Z^*．

(4) 考查当前点，若其目标值不优于 Z^*，则弃之不用；若优于 Z^*，再检查是否满足所有的约束，若确为可行点，则将目标值作为新过滤值，再考查下一个点．

由于每个点的所有分量都只有 0，1 两种取值，且目标函数的变量是按系数上升的次序排列的．因此，对于所拥有 k(k 是某个小于 n 的给定的已知整数)个 1 分量的 0-1 型 n 维向量而言，目标函数值最大的点是

$$\boldsymbol{x}_k^{(1)}=(0,\cdots,0,0,1,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}},$$

其次是

$$\boldsymbol{x}_k^{(2)}=(0,\cdots,0,1,0,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}}.$$

因此，在检查有 k 个 1 分量的 0-1 型向量时，应首先验证 $\boldsymbol{x}_k^{(1)}$．若 $\boldsymbol{x}_k^{(1)}$ 是可行点，则不再考虑其余的有 k 个 1 分量的 0-1 型向量；若 $\boldsymbol{x}_k^{(1)}$ 不是可行点，再考虑 $\boldsymbol{x}_k^{(2)}$．若 $\boldsymbol{x}_k^{(2)}$ 也不是可行点，才考虑其余的 k 个 1 分量的 0-1 型向量．

例 4.6 求解 0-1 型整数线性规划：

$$\begin{aligned}\max\quad & Z=4x_1+x_2+2x_3,\\ \text{s.t.}\quad & 2x_1+2x_2+3x_3\leqslant 5,\\ & 4x_1-3x_2+2x_3\leqslant 4,\\ & x_i=0,1,\quad i=1,2,3.\end{aligned}$$

解 将原问题的变量按目标函数系数升序排列，改写为

$$\max \quad Z = x_2 + 2x_3 + 4x_1,$$

$$\text{s.t.} \quad 2x_2 + 3x_3 + 2x_1 \leqslant 5, \qquad (1)$$

$$-3x_2 + 2x_3 + 4x_1 \leqslant 4. \qquad (2)$$

显然，(0, 0, 0)是一个可行点，故可取初始过滤值为 $Z^* = 0$. 本题的求解过程见表 4.11. 在表 4.11 中，符号"√"代表对应的约束条件满足，而"×"则表示约束条件不满足. 从表 4.11 中，可以看出，本问题应有 3 个 0-1 型向量拥有 1 个 1 分量，即(0,0,1)，(0,1,0)和(1,0,0). 由于(0,0,1)是可行点，故其余两个不再检验. 而在具有 2 个 1 分量的 0-1 型向量中，(0,1,1)不是可行点，因而需检验(1,0,1)的可行性. 由表 4.11 可知原问题的最优解和最优值为

$$x_1 = 1,\ x_2 = 1,\ x_3 = 0,$$

$$Z^* = 5.$$

表 4.11

(x_2, x_3, x_1)	(0,0,0)	(0,0,1)	(0,1,1)	(1,0,1)	(1,1,1)
目标值	0	4	6	5	7
约束(1)	√	√	√	√	×
约束(2)	√	√	×	√	
过滤值 Z^*	0	4		5	

例 4.7 求解 0-1 型整数规划：

$$\min \quad Z = 3x_1 + 5x_2 + 6x_3 + 4x_4 + x_5,$$

$$\text{s.t.} \quad 2x_1 - 3x_2 + 5x_3 - 4x_4 + 3x_5 \geqslant 1,$$

$$3x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 + x_5 \geqslant 4,$$

$$-2x_1 - x_2 + 8x_3 - 3x_4 + x_5 \geqslant 3,$$

$$x_j = 0, 1, \quad j = 1, 2, 3, 4, 5.$$

解 原问题是极小化问题，将目标函数系数按降序排列，得

$$\min \quad Z = 6x_3 + 5x_2 + 4x_4 + 3x_1 + x_5,$$

$$\text{s.t.} \quad 5x_3 - 3x_2 - 4x_4 + 2x_1 + 3x_5 \geqslant 1, \qquad (1)$$

$$x_3 + 5x_2 + 3x_4 + 3x_1 + x_5 \geqslant 4, \qquad (2)$$

$$8x_3 - x_2 - 3x_4 - 2x_1 + x_5 \geqslant 3, \qquad (3)$$

$$x_j = 0, 1, \quad j = 1, 2, 3, 4, 5.$$

由约束条件(3)可以知道，必须有 $x_3 = 1$，又由于原问题是求极小化，故过滤值应尽可能小. 本问题求解过程见表 4.12，最优解及最优值为

$$x_1 = 1,\ x_2 = 0,\ x_3 = 1,\ x_4 = 0,\ x_5 = 0,$$

$$Z^* = 9$$

由于例 4.7 的目标函数系数全为正，因此其余点的目标函数将更大，肯定不是最优解，不必对其可行性进行检验.

表 4.12

点 $(x_3, x_2, x_4, x_1, x_5)$	目标值	约束条件			过滤值
		(1)	(2)	(3)	
(1, 0, 0, 0, 0)	6	✓	×		
(1, 0, 0, 0, 1)	7	✓	×		
(1, 0, 0, 1, 0)	9	✓	✓	✓	9

对于非线性的 0-1 型整数规划，可以化为 0-1 型线性整数规划来处理.

例 4.8 求解非线性 0-1 型整数规划：

$$
\begin{aligned}
\max \quad & f = 3x_1^2 + 2x_2x_3 - x_3^2, \\
\text{s.t.} \quad & 2x_1^2 - 3x_2 + x_3 \leqslant 5, \\
& x_j = 0, 1, \quad j = 1, 2, 3.
\end{aligned}
$$

解 由于 $x_j = 0, 1$，故

$$x_j^k = x_j, \tag{4.4.1}$$

又引入辅助变量

$$y = x_2x_3.$$

显然有

$$y = \begin{cases} 1, & x_2 = x_3 = 1, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \tag{4.4.2}$$

易验证，(4.4.2)等价于不等式组(4.4.3)，即

$$x_2 + x_3 - 1 \leqslant y \leqslant \frac{1}{2}(x_2 + x_3), \tag{4.4.3}$$

于是，原问题化为

$$
\begin{aligned}
\max \quad & f = 3x_1 + 2y - x_3, \\
\text{s.t.} \quad & 2x_1 - 3x_2 + x_3 \leqslant 5, \\
& x_2 + x_3 - y \leqslant 1, \\
& -x_2 - x_3 + 2y \leqslant 0, \\
& x_j,\ y = 0 \text{ 或 } 1,\ j = 1, 2, 3.
\end{aligned}
$$

将目标函数按升序重排，得

$$
\begin{aligned}
\max \quad & f = -x_3 + 0x_2 + 2y + 3x_1, \\
\text{s.t.} \quad & x_3 - 3x_2 + 2x_1 \leqslant 5, & (1) \\
& x_3 + x_2 - y \leqslant 1, & (2) \\
& -x_3 - x_2 + 2y \leqslant 0, & (3) \\
& x_j,\ y = 0, 1, \quad j = 1, 2, 3.
\end{aligned}
$$

求解过程见表 4.13.

表 4.13

点 (x_3, x_2, y, x_1)	目标值	约束条件			过滤值
		(1)	(2)	(3)	
(0, 0, 0, 0)	0	✓	✓	✓	0
(0, 0, 0, 1)	3	✓	✓	✓	3
(0, 0, 1, 1)	5	✓	✓	×	
(0, 1, 0, 1)	3	✓	✓	✓	3
(0, 1, 1, 1)	5	✓	✓	×	
(1, 0, 1, 1)	4	✓	✓	×	
(1, 1, 0, 1)	2	✓	✓	✓	
(1, 1, 1, 1)	4	✓	✓	✓	4

在本题中，(1,1,1,1)满足约束条件，是最优解，最优值是 4.

习　题

1. 分别用割平面法和分枝定界法求解整数规划问题

$$\begin{aligned} \max\quad & Z = x_1 + 4x_2, \\ \text{s.t.}\quad & 14x_1 + 42x_2 \leqslant 196, \\ & -x_1 + 2x_2 \leqslant 5, \\ & x_1,\quad x_2 \geqslant 0. \end{aligned}$$

2. 用分枝定界法求解混合整数规划问题

$$\begin{aligned} \min\quad & Z = 3x_1 + 7x_2, \\ \text{s.t.}\quad & 2x_1 + 3x_2 \leqslant 12, \\ & -x_1 + x_2 \leqslant 2, \\ & x_1,\quad x_2 \geqslant 0, \\ & x_1 \text{ 是整数}. \end{aligned}$$

3. 求解整数规划问题

$$\begin{aligned} \max\quad & Z = 65x_1 + 80x_2 + 30x_3, \\ \text{s.t.}\quad & 2x_1 + 3x_2 + x_3 \leqslant 5, \\ & x_1,\quad x_2,\quad x_3 \geqslant 0, \\ & x_1, x_2, x_3 \text{ 是整数}. \end{aligned}$$

4. 某工厂接受 A 产品订货，需要量为每天 4000kg，现有 B_1，B_2，B_3 三种生产过程可供选择，各生产过程需要的固定成本(单位：元)单位产品变动成本(单位：元/kg)以及最大日产量(单位：kg)见表 4.14. 该厂决策者需要作出正确的决策，确定采用哪种(一种或多种)生产过程及日产多少 A 产品，以保证既能按时交货，又使生产总成本最少. 试建立本问题的数学模型.

表 4.14

生产过程	固定成本/元	单位变动成本/(元/kg)	最大日产量/kg
B_1	1200	6	2500
B_2	2300	5	3700
B_3	3500	4	4200

5.用隐枚举法求解 0-1 型整数规划

$$
\begin{aligned}
\max \quad & Z = 3x_1 + x_2 + 4x_3 + 2x_4, \\
\text{s.t.} \quad & x_1 + 3x_2 - 2x_3 + x_4 \leqslant 2, \\
& 3x_1 - x_2 + x_3 + 2x_4 \leqslant 2, \\
& x_1 + x_2 - x_3 + x_4 \leqslant 3, \\
& x_j = 0, 1, \quad j = 1, 2, 3, 4.
\end{aligned}
$$

第5章 多目标规划

在许多实际决策问题中，通常包括多个不相容的目标，而且要同时考虑. 例如，设计一个导弹，既要射程最远，又要燃料最省，还要质量最轻，精度最高. 在确定一个橡胶配方时，往往要求同时考察强度、硬度、变形、伸长等多个目标. 这类问题称为多目标规划问题(multiobjective programming)，它们的早期来源是经济理论，现在已应用于工程优化设计、地区发展规划、数理经济学和环境保护问题等许多领域.

5.1 多目标规划问题举例

例 5.1 买糖问题 设商店有 A_1，A_2，A_3 三种糖果，单价分别为 4.00，2.80 和 2.40 元/kg，现要筹办一次茶话会，要求用于买糖的钱数不超过 20 元. 糖的总量不少于 6kg，A_1，A_2 两种糖的总和不少于 3kg，问应如何确定最好的买糖方案?

设 x_1，x_2，x_3 分别为购买 A_1，A_2，A_3 三种糖的数量. 用于买糖所花费的总钱数为 y_1，所买糖的总数量为 y_2. 自然希望 y_1 取最小值，y_2 取最大值，即

$$y_1=4x_1+2.8x_2+2.4x_3 \quad \to \min$$

$$y_2=x_1+x_2+x_3 \quad \to \max$$

而约束条件为

$$\begin{cases}4x_1+2.8x_2+2.4x_3\leqslant 20,\\ x_1+x_2+x_3\geqslant 6\\ x_1+x_2\geqslant 3,\\ x_1,\ x_2,\ x_3\geqslant 0.\end{cases}$$

可见，这是一个包含两个目标的线性规划问题，称为多目标线性规划问题. 由于求 y_2 的最大值可转化为求$(-y_2)$的最小值，所以上述问题可归结为

$$\left.\begin{array}{ll}\text{V-min} & (f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}},\\ \text{s.t.} & 4x_1+2.8x_2+2.4x_3\leqslant 20,\\ & x_1+x_2+x_3\geqslant 6,\\ & x_1+x_2\geqslant 3,\\ & x_1,\ x_2,\ x_3\geqslant 0.\end{array}\right\} \tag{5.1.1}$$

其中，$f_1(\boldsymbol{x})=y_1$，$f_2(\boldsymbol{x})=-y_2$，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$，符号“V-min”表示求向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}$的最小值. 而一般的多目标数学规划问题可以写成

$$\begin{array}{ll}\text{V-min} & \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\\ \text{s.t.} & g_i(\boldsymbol{x})\leqslant 0,\quad i=1,2,\cdots,m.\end{array} \tag{5.1.2}$$

其中，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}),\cdots,f_p(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}$，$p\geqslant 2$.

令 $R=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m\}$，称 R 为问题(5.1.2)的可行集或约束集，称 $x\in R$ 为问题(5.1.2)的可行解. 多目标规划问题与前面所讲的线性与非线性问题的主要区别在于：它所追求的目标不只一个，而是 p 个($p\geqslant 2$).

例 5.2 生产计划问题 某纺织厂生产 A_1, A_2, A_3 三种布料，该厂两班生产，每周生产时间为 90h，每周的能耗不得超过 150t 标准煤，其他数据见表 5.1. 问每周生产三种布料各多少小时，才能使该厂的利润最多，而能源消耗最少？

表 5.1

布料名	生产数量/(m/h)	利润/(元/m)	最大销量/(m/周)	能耗/(t/1000m)
A_1	400	0.25	40000	1.2
A_2	500	0.20	48000	1.3
A_3	360	0.30	30000	1.4

该厂每周生产三种布料 A_1, A_2, A_3 的小时数分别为 x_1, x_2, x_3，总利润为 y_1 元，总能源消耗量为 y_2 吨标准煤，则上述问题可归结为如下的多目标线性规划问题：

$$\left.\begin{aligned}
&\text{V-min}\quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}},\\
&\text{s.t.}\quad x_1+x_2+x_3\leqslant 90,\\
&\quad 1.2\times10^{-3}\times400x_1+1.3\times10^{-3}\times500x_2+1.4\times10^{-3}\times360x_3\leqslant 150,\\
&\quad 400x_1\leqslant 40000,\\
&\quad 500x_2\leqslant 48000,\\
&\quad 360x_3\leqslant 30000,\\
&\quad x_1,\ x_2,\ x_3\geqslant 0.
\end{aligned}\right\}\tag{5.1.3}$$

其中，
$$f_1(\boldsymbol{x})=-y_1,\ f_2(\boldsymbol{x})=y_2,\ \boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}},$$
$$y_1=0.25\times400x_1+0.2\times500x_2+0.3\times360x_3,$$
$$y_2=1.2\times10^{-3}\times400x_1+1.3\times10^{-3}\times500x_2+1.4\times10^{-3}\times360x_3.$$

例 5.3 光学系统的自动设计 一个光学系统，如照相机头、显微镜的物镜和目镜、望远镜及电影放映机的镜头等，一般是由若干个球面透镜组成的，制造这些透镜的材料是具有不同折射率的光学玻璃. 各个镜面都有一定大小的半径和厚度，各镜面之间保持一定的间隔. 一个光学系统中各个透镜镜面的半径、厚度、镜面间距及各透镜所用光学玻璃的折射率等，称为这一光学系统的结构参数. 这些参数的大小，直接影响光学系统的成像质量. 所谓一个光学系统的自动设计问题就是根据系统的要求，设法自动确定各个结构参数的大小，使系统的成像质量最好，而与成像质量有关的是要考察若干个像差指标 $f_i(\boldsymbol{x})$ ($i=1,2,\cdots,m$). 对于一个光学系统，其像差指标值可以事先选定，设为 $f_i^*(\boldsymbol{x})$ ($i=1,2,\cdots,m$). 因此，光学系统的优化设计问题可以化为如下多目标规划问题：

$$\left.\begin{aligned}
&\text{V-min}\quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x})-f_1^*,f_2(\boldsymbol{x})-f_2^*,\cdots,f_m(\boldsymbol{x})-f_m^*)^{\mathrm{T}},\\
&\text{s.t.}\quad \boldsymbol{x}\in A.
\end{aligned}\right\}\tag{5.1.4}$$

其中，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 为结构参数，$\boldsymbol{x}\in A$ 表示对结构参数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的某些限制条件.

问题(5.1.4)是一个含有 m 个目标的多目标非线性规划问题.

由上面的几个例子可以看出，在许多实际问题中，各个目标的量纲一般是不相同的，所以有必要把每个目标事先规范化，例如，对第 j 个带量纲的目标 $F_j(x)$，可令

$$f_j(x)=F_j(x)/F_j.$$

其中，$F_j=\min\limits_{x\in R}F_j(x)$，$R=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m\}$.

这样，$f_j(x)$就是规范化的目标了．因此，在以后的叙述里，不妨假设多目标规划问题中的目标都是已经规范化了的．

5.2 多目标规划问题的解集和像集

5.2.1 多目标规划问题的解集

考察如下多目标规划问题：

$$\left.\begin{aligned}&\text{V-min}\quad F(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_p(x))^{\mathrm T},\\&\text{s.t.}\quad g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m.\end{aligned}\right\}\tag{5.2.1}$$

其中，$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm T}$，$p\geqslant 2$.

令 $R=\{x\mid g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m\}$，

定义 5.1 设 $x^*\in R$，若对任意 $x\in R$ 及 $i=1,2,\cdots,p$，都有 $f_i(x^*)\leqslant f_i(x)$成立，则称 x^*为问题(5.2.1)的绝对最优解．而 $F^*=(f_1(x^*),\ f_2(x^*),\ \cdots,\ f_p(x^*))^{\mathrm T}$称为绝对最优值．

例如，若 $f_1(x)=x^2$，$f_2(x)=x^2+1$，则问题

$$\begin{aligned}&\text{V-min}\quad F(x)=(f_1(x),f_2(x))^{\mathrm T},\\&\text{s.t.}\quad -3\leqslant x\leqslant 3\end{aligned}\tag{5.2.2}$$

的绝对最优解为 $x^*=0$，绝对最优值为 $F^*=(0,1)^{\mathrm T}$.

若 $f_1(x)=x_1^2+x_2^2$，$f_2(x)=x_1^2+x_2^2+1$，则问题

$$\begin{aligned}&\text{V-min}\quad F(x)=(f_1(x),f_2(x))^{\mathrm T},\\&\text{s.t.}\quad -1\leqslant x_1\leqslant 1,\ -1\leqslant x_2\leqslant 1\end{aligned}\tag{5.2.3}$$

的绝对最优解为 $x^*=(0,0)^{\mathrm T}$，绝对最优值为 $F^*=(0,1)^{\mathrm T}$.

若 $f_1(x)=x^2$，$f_2(x)=(x-1)^2$，则问题(5.2.2)没有绝对最优解，或者说它的绝对最优解不存在．因此，要寻找另外意义下的解，为此，引入如下符号．

(1) 符号"<"

令

$$F(x^{(1)})=(f_1(x^{(1)}),f_2(x^{(1)}),\cdots,f_p(x^{(1)}))^{\mathrm T},$$
$$F(x^{(2)})=(f_1(x^{(2)}),f_2(x^{(2)}),\cdots,f_p(x^{(2)}))^{\mathrm T},$$

$F(x^{(1)})<F(x^{(2)})$等价于 $f_j(x^{(1)})<f_j(x^{(2)})$，$j=1,2,\cdots,p$.

(2)符号"≤"

$F(x^{(1)})\leqslant F(x^{(2)})$等价于 $f_j(x^{(1)})\leqslant f_j(x^{(2)})$，$j=1,2,\cdots,p$.

且至少存在某个 $j_0(1\leqslant j_0\leqslant p)$，使 $f_{j_0}(x^{(1)})<f_{j_0}(x^{(2)})$.

定义 5.2 设 $x^*\in R$，若不存在 $x\in R$，满足 $F(x)\leqslant F(x^*)$，则称 x^*为问题

(5.2.1)的有效解，或者称为 Pareto 解，也称为非劣解.

定义 5.3 设 $x^* \in R$，若不存在 $x \in R$，满足 $F(x) < F(x^*)$，则称 x^* 为问题(5.2.1)的弱有效解，或者称为弱 Pareto 解，也称为弱非劣解.

用 R^* 表示问题(5.2.1)的绝对最优解所组成的集合，用 R^*_{pa} 表示问题(5.2.1)的有效解所成的集合，用 R^*_{wp} 表示(5.2.1)的弱有效解所成的集合，易见 $x^* \in R^*_{pa}$，意味着找不到一个可行解 $x \in R$，使 $F(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_p(x))^{\mathrm{T}}$ 的每一个目标函数值都不比 $F(x^*) = (f_1(x^*), f_2(x^*), \cdots, f_p(x^*))^{\mathrm{T}}$ 的相应目标函数值坏，并且 $F(x)$ 至少有一个目标函数值比 $F(x^*)$ 的相应目标函数值好. 即当 $x^* \in R^*_{pa}$ 时，x^* 在"$\leqslant$"意义下，已找不到另一个可改进的可行解 x 了.

$x^* \in R^*_{wp}$，意味着找不到一个可行解 $x \in R$，使得 $F(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_p(x))^{\mathrm{T}}$ 的每一个目标函数值都比 $F(x^*) = (f_1(x^*), f_2(x^*), \cdots, f_p(x^*))^{\mathrm{T}}$ 的相应目标函数值严格地好，即当 $x^* \in R^*_{wp}$ 时，x^* 在"$<$"意义下，已找不到另一个可"改进"的可行解 x 了.

如果用 $R_j^* (j = 1, 2, \cdots, p)$ 表示单目标规划问题

$$\begin{aligned} &\min \quad f_j(x), \\ &\text{s.t.} \quad g_i(x) \leqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned}$$

的最优解所组成的集合. 则显然有

$$R^* = \bigcap_{j=1}^{p} R_j^*.$$

$R^*, R^*_{pa}, R^*_{wp}, R, R_1^*, R_2^*, \cdots, R_p^*$ 之间的关系由下面的几个定理给出.

定理 5.1 $R^*_{pa} \subset R^*_{wp} \subset R$.

证明 $R^*_{wp} \subset R$ 是显然的，所以只需证 $R^*_{pa} \subset R^*_{wp}$.

用反证法. 假设有 $x \in R^*_{pa}$，但 $x \notin R^*_{wp}$. 由定义 5.3 可知，必存在 $y \in R$，使 $F(y) < F(x)$，即对 $j = 1, 2, \cdots, p$，有 $f_j(y) < f_j(x)$ 成立，所以 y 满足 $F(y) \leqslant F(x)$，由此推出 $x \notin R^*_{pa}$，这与假设相矛盾，因此应有 $x \in R^*_{wp}$，即 $R^*_{pa} \subset R^*_{wp}$ 成立.

同理可得出定理 5.2 和定理 5.3.

定理 5.2 $R_j^* \subset R^*_{wp}$，$j = 1, 2, \cdots, p$.

定理 5.3 $R^* \subset R^*_{pa}$.

由上述定理得知 $R^* \subset R^*_{pa} \subset R^*_{wp} \subset R$，$R_j^* \subset R^*_{wp}$，$j = 1, 2, \cdots, p$.

定义 5.4 若问题(5.2.1)中，$f_1(x), f_2(x), \cdots, f_p(x)$ 和 $g_1(x), g_2(x), \cdots, g_m(x)$ 均为凸函数，则称(5.2.1)为凸多目标规划.

一般来说，对于凸多目标规划(5.2.1)，其 R^*_{pa}，R^*_{wp} 也不一定是凸集.

5.2.2 多目标规划问题的像集

在(5.2.1)中，取定一可行解 $x^{(0)} \in R$，得到对应的目标函数值

$$F(x^{(0)}) = (f_1(x^{(0)}), f_2(x^{(0)}), \cdots, f_p(x^{(0)}))^{\mathrm{T}},$$

$F(x^{(0)})$ 可视为 p 维欧氏空间 E^p 中的一个点. 一般来说，对于任意 $x \in R$，都可得到 E^p 中的一个点 $F(x)$，于是可以定义一个映射 F：

$$x \xrightarrow{F} F(x).$$

令 $\boldsymbol{F}(R)=\{\boldsymbol{F}(x)|x\in R\}$，则称 $\boldsymbol{F}(R)$为可行集 R 在映射$\boldsymbol{F}$ 之下的像集.

对任意 $\boldsymbol{x}^{(0)}\in R$，称 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)})\in \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R})$为点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$在映射 $\boldsymbol{F}$ 之下的像. 若某个 $\boldsymbol{F}^{(0)}\in \boldsymbol{F}(R)$,则至少存在一个点 $\boldsymbol{x}^{(0)}\in R$，使 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)})=\boldsymbol{F}^{0}$，称 $\boldsymbol{x}^{(0)}$为 $\boldsymbol{F}^{0}$ 的一个原像.

一般来说，对于凸多目标规划(5.2.1)，其像集 $\boldsymbol{F}(R)$不一定是凸集.

定义 5.5 设 $\overline{F}\in F(R)$，若不存在 $F\in F(R)$，满足 $F\leqslant\overline{F}$，则称 $\overline{F}$ 为像集$F(R)$的有效点，用 E_{pa}^{*}表示全体有效点所成的集合.

定义 5.6 设 $\overline{F}\in F(R)$，若不存在 $F\in F(R)$，满足 $F<\overline{F}$，则称 $\overline{F}$ 为像集$F(R)$的弱有效点，用 E_{wp}^{*}表示全体弱有效点所成的集合.

易证像集 $\boldsymbol{F}(R)$的有效点一定是弱有效点，即恒有 $E_{pa}^{*}\subset E_{wp}^{*}$成立.

5.3 处理多目标规划问题的一些方法

对于多目标规划问题，常用的方法有约束法、分层序列法、评价函数法、逐步法等. 下面将从实用的角度介绍各种方法.

5.3.1 约束法

从问题(5.2.1)的 p 个目标函数$f_1(x),f_2(x),\cdots,f_p(x)$中，若能够确定出一个主要目标，例如 $f_1(x)$，而对其他的目标函数 $f_2(x),\cdots,f_p(x)$只要求满足一定的条件即可，例如要求 $a_i\leqslant f_i(x)\leqslant b_i$，$i=2,3,\cdots,p$.

这样，就可以把其他目标当作约束处理，则问题(5.2.1)可化为求解如下的非线性规划问题：

$$\begin{aligned}\min\quad & f_1(x),\\ \text{s.t.}\quad & g_i(x)\leqslant 0,\\ & a_j\leqslant f_j(x)\leqslant b_j.\end{aligned}$$

5.3.2 分层序列法

求解问题(5.2.1)的分层序列法是把其中的 p 个目标，按其重要程度安排一个次序，例如不妨设问题(5.2.1)中的 p 个目标的次序已经排好：$f_1(x)$最重要，$f_2(x)$次之，$f_3(x)$再次之，最后一个目标为 $f_p(x)$. 先求问题

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & f_1(x),\\ \text{s.t.}\quad & g_i(x)\leqslant 0,\quad i=1,2,\cdots,m\end{aligned}\right\}\qquad (P_1)$$

的最优解 $x^{(1)}$及最优值 f_1^{*}. 即

$$\min_{x\in R} f_1(x)=f_1^{*}.$$

其中,$R=\{x|g_i(x)\leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m\}$.

再求解问题

$$\left.\begin{aligned}\min\quad & f_2(x),\\ \text{s.t.}\quad & x\in R_1.\end{aligned}\right\}\qquad (P_2)$$

其中,$R_1=R\cap\{x|f_1(x)\leqslant f_1^{*}\}$.

设问题(P_2)的最优解为 $x^{(2)}$，最优值为 $f_2^{*}=\min\limits_{x\in R_1}f_2(x)$，继续求解问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f_3(x),\\ \text{s.t.} & x\in R_2.\end{array}\right\}\qquad (P_3)$$

其中，$R_2=R_1\cap\{x\mid f_2(x)\leqslant f_2^*\}$.

如此继续下去，直到求出第 p 个问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f_p(x),\\ \text{s.t.} & x\in R_{p-1}\end{array}\right\}\qquad (P_p)$$

的最优解 $x^{(p)}$ 及最优值 f_p^*. 其中，

$$R_{p-1}=R_{p-2}\cap\{x\mid f_{p-1}(x)\leqslant f_{p-1}^*\}.$$

这样求得的 $x^{(p)}$ 就是问题(5.2.1)在分层序列意义下的最优解，即 $x^*=x^{(p)}$，而

$$\boldsymbol{F}^*=(f_1(x^*),f_2(x^*),\cdots,f_p(x^*))^{\mathrm{T}}$$

为问题(5.2.1)的最优值，可以证明 x^* 是问题(5.2.1)的有效解，即有如下定理.

定理 5.4 设 x^* 是由分层序列法求得的问题(5.2.1)的最优解，则必有 $x^*\in R_{pa}^*$.

证明 用反证法. 假设 $x^*\notin R_{pa}^*$，则必存在 $y\in R$，使 $\boldsymbol{F}(y)\leqslant\boldsymbol{F}(x^*)$. 下面分两种情况讨论.

(1) 若 $f_1(y)<f_1(x^*)$，则因为 $f_1(x^*)=f_1^*$，于是得到(P_1)的一个可行解 y，满足

$$f_1(y)<f_1(x^*)=f_1^*.$$

这与 $f_1^*=\min\limits_{x\in R}f_1(x)$ 相矛盾.

(2) 若 $f_j(x)=f_j(x^*)$，$j=1,2,\cdots,j_0-1$，而

$$f_{j_0}(y)<f_{j_0}(x^*),\quad 2\leqslant j_0\leqslant p.$$

这时，由于 $f_j(x^*)\leqslant f_j^*\ (j=1,2,\cdots,j_0-1)$，所以

$$f_j(y)=f_j(x^*)\leqslant f_j^*,\quad j=1,2,\cdots,j_0-1.$$

因此，y 是问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & f_{j_0}(x),\\ \text{s.t.} & x\in R_{j_0-1}\end{array}\right\}\qquad (P_{j_0})$$

的一个可行解，又因 $f_{j_0}(y)<f_{j_0}(x^*)=f_{j_0}^*$，这与 $f_{j_0}^*$ 是问题(P_{j_0})的最优值相矛盾. 综合(1)，(2)，即知定理 5.4 的结论成立.

对上述的分层序列法稍加分析即可看出，若对某个问题(P_i)，其最优解是唯一的，则问题$(P_{i+1}),\cdots,(P_p)$的最优解也是唯一的，且 $x^{(i+1)}=x^{(i+2)}=\cdots=x^{(p)}=x^{(i)}$. 因此，常将分层序列法修改如下：选取一组适当的小正数 $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_{p-1}$，称为宽容值，即按照各个目标函数的不同要求，预先给定关于相应目标函数最优值的允许误差，将问题(P_j)修改为

$$\begin{array}{ll}\min & f_j(x)\\ \text{s.t.} & x\in R_{j-1}=R_{j-2}\cap\{x\mid f_{j-1}(x)\leqslant f_{j-1}^*+\varepsilon_{j-1}\},\quad j=2,3,\cdots,p.\end{array}$$

再按上述的分层序列法依次求解各问题$(P_2),(P_3),\cdots,(P_p)$.

5.4 评价函数法

评价函数法是一大类方法，它的基本思想是：针对多目标规划问题(5.2.1)构造一个

评价函数 $h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))$，然后求解问题

$$\left.\begin{array}{ll}\min & h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})),\\ \text{s.t.} & \boldsymbol{x}\in R.\end{array}\right\} \tag{5.4.1}$$

用(5.4.1)的最优解 $\boldsymbol{x}^*$ 作为问题(5.2.1)的最优解. 当 $h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))$满足某种单调性质时，$\boldsymbol{x}^*$ 一定是问题(5.2.1)的有效解或弱有效解. 为此，引入如下定义和定理.

定义 5.7 若对任意 $\boldsymbol{F}$, $\overline{\boldsymbol{F}}\in E^p$, 且 $\boldsymbol{F}\leqslant\overline{\boldsymbol{F}}$, 都有 $h(\boldsymbol{F})<h(\overline{\boldsymbol{F}})$成立，则称 $h(\boldsymbol{F})$是 $\boldsymbol{F}$ 的严格单调增函数.

定义 5.8 若对任意 $\boldsymbol{F}$, $\overline{\boldsymbol{F}}\in E^p$, 且 $\boldsymbol{F}<\overline{\boldsymbol{F}}$, 都有 $h(\boldsymbol{F})<h(\overline{\boldsymbol{F}})$成立，则称 $h(\boldsymbol{F})$是 $\boldsymbol{F}$ 的单调增函数.

定理 5.5 设 $\boldsymbol{F}\in E^p$, 若 $h(\boldsymbol{F})$是 $\boldsymbol{F}$ 的严格单调增函数，则问题(5.4.1)的最优解 $\boldsymbol{x}^*\in R_{pa}^*$.

证明 用反证法. 设 $\boldsymbol{x}^*\notin R_{pa}^*$, 则必存在 $y\in R$, 使 $\boldsymbol{F}(y)\leqslant\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*)$. 由于 $h(\boldsymbol{F})$是 $\boldsymbol{F}$ 的严格单调增函数，所以有 $h(\boldsymbol{F}(y))<h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*))$, 这与 $\boldsymbol{x}^*$是问题(5.4.1)的最优解相矛盾.

用同样的方法可证明：

定理 5.6 设 $\boldsymbol{F}\in E^p$, 若 $h(\boldsymbol{F})$是 $\boldsymbol{F}$ 的单调增函数，则问题(5.4.1)的最优解 $\boldsymbol{x}^*\in R_{wp}^*$.

在构造评价函数时，应该构造为严格单调增函数或单调增函数，于是根据定理 5.5 或定理 5.6 知，$\boldsymbol{x}^*\in R_{pa}^*$或$\boldsymbol{x}^*\in R_{wp}^*$. 由于可以用不同的方法构造评价函数，因此有各种不同的评价函数方法. 下面介绍常用的几种方法.

5.4.1 理想点法

理想点法的基本思想是定义一种模，在这种模的意义下，找一个点，尽量接近理想点 $\boldsymbol{F}^*$，使

$$h(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{F}^*\|_q\to\min,$$

因此称之为理想点法.

在问题(5.2.1)中，先分别求解 p 个单目标规划问题

$$\left.\begin{array}{lll}\min & f_i(\boldsymbol{x}), & i=1,2,\cdots,p,\\ \text{s.t.} & g_j(\boldsymbol{x})\leqslant 0, & j=1,2,\cdots,m.\end{array}\right\} \tag{5.4.2}$$

令 $f_i^*=\min\limits_{\boldsymbol{x}\in R} f_i(\boldsymbol{x})$, $i=1,2,\cdots,p$, 其中

$$R=\{\boldsymbol{x}\mid g_j(\boldsymbol{x})\leqslant 0,\quad j=1,2,\cdots,m\}.$$

构造评价函数

$$h(\boldsymbol{x})\triangleq h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))=\sqrt{\sum_{i=1}^{p}(f_i(\boldsymbol{x})-f_i^*)^2}. \tag{5.4.3}$$

再求解问题(5.4.1)，取其最优解 $\boldsymbol{x}^*$作为问题(5.2.1)的最优解. $h(\boldsymbol{x})$也可以取为更一般的形式

$$h(\boldsymbol{x})=\left[\sum_{i=1}^{p}(f_i(\boldsymbol{x})-f_i^*)^q\right]^{\frac{1}{q}},\quad q>1\text{ 为整数}.$$

以上求得的向量 $\boldsymbol{F}^*=(f_1^*,f_2^*,\cdots,f_p^*)^{\mathrm{T}}$ 只是一个理想点，一般不能达到它.

5.4.2 平方和加权法

先求出各个单目标规划问题(5.4.2)的一个尽可能好的下界 $f_1^0, f_2^0, \cdots, f_p^0$, 即

$$\min_{x \in R} f_i(x) \geqslant f_i^0, \quad i = 1, 2, \cdots, p,$$

然后构造评价函数

$$h(x) = h(F(x)) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i (f_i(x) - f_i^0)^2. \tag{5.4.4}$$

其中, $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$ 为选定的一组权系数, 它们满足

$$\sum_{i=1}^{p} \lambda_i = 1, \quad \lambda_i > 0, \ i = 1, 2, \cdots, p.$$

再求出问题(5.4.1)的最优解 x^* 作为(5.2.1)的最优解.

权系数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$ 的选取方法有以下几种.

(1) 老手法

老手是指有关方面的专家、有经验的工人和干部等, 邀请一批老手(N 个), 请他们各自独立地填写如下的调查表(见表 5.2).

表 5.2

老手 \ 权系数 \ 目标	$f_1(x)$	$f_2(x)$	…	$f_p(x)$
	λ_1	λ_2	…	λ_p
1	λ_{11}	λ_{12}	…	λ_{1p}
⋮	⋮	⋮		⋮
N	λ_{N1}	λ_{N2}	…	λ_{Np}

其中, λ_{ij}是第 i 个老手对第 j 个目标 $f_j(x)$ 给出的权系数($i = 1, 2, \cdots, N$; $j = 1, 2, \cdots, p$).

在表 5.2 填好后, 用下式可计算出权系数 $\lambda_j (j = 1, 2, \cdots, p)$ 的平均值.

$$\lambda_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \lambda_{ij}, \quad j = 1, 2, \cdots, p,$$

然后对每个老手 $i(1 \leqslant i \leqslant N)$, 算出其估计值 λ_{ij} 与平均值 λ_j 的偏差, 即

$$\delta_{ij} = |\lambda_{ij} - \lambda_j|, \quad j = 1, 2, \cdots, p,$$

再请偏差最大的老手发表意见, 通过充分讨论后, 再对权系数作适当的调整, 以便获得较为可靠的数据.

(2) α 方法

α 方法是由 Карпелевиц 等在 1975 年提出的. 为了便于理解, 先介绍 $p = 2$ 情形的 α 方法. 首先求出问题

$$\min \ f_i(x), \quad i = 1, 2,$$
$$\text{s.t.} \ \ x \in R$$

的最优解, 设为 $x^{(i)} (i = 1, 2,)$. 令

$$f_1^1 = f_1(x^{(1)}), f_2^1 = f_2(x^{(1)}),$$
$$f_1^2 = f_1(x^{(2)}), f_2^2 = f_2(x^{(2)}).$$

设过点 $(f_1^1, f_2^1)^{\mathrm{T}}$ 和 $(f_1^2, f_2^2)^{\mathrm{T}}$ 的直线方程为

$$\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 = \beta. \tag{5.4.5}$$

其中，系数 $\lambda_1, \lambda_2, \beta$ 待定，不妨假设

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1. \tag{5.4.6}$$

将点$(f_1^1, f_2^1)^{\mathrm{T}}$和$(f_1^2, f_2^2)^{\mathrm{T}}$的坐标代入(5.4.5)，得

$$\left.\begin{aligned} \lambda_1 f_1^1 + \lambda_2 f_2^1 = \beta, \\ \lambda_1 f_1^2 + \lambda_2 f_2^2 = \beta. \end{aligned}\right\} \tag{5.4.7}$$

若问题(5.2.1)不存在绝对最优解，则有

$$f_1^2 = f_1(x^{(2)}) > f_1(x^{(1)}) = f_1^1,$$

$$f_2^1 = f_2(x^{(1)}) > f_2(x^{(2)}) = f_2^2.$$

若 $f_1^2 = f_1^1$，则说明 $x^{(2)}$也是问题(P_1)的最优解. 由于 $x^{(2)}$已是问题(P_2)的最优解，因此 $x^{(2)}$是问题(5.2.1)的绝对最优解. 这与假设问题(5.2.1)不存在绝对最优解相矛盾. 由方程(5.4.6)和(5.4.7)联立，可求出权系数

$$\begin{cases} \lambda_1 = \dfrac{f_2^1 - f_2^2}{(f_1^2 - f_1^1) + (f_2^1 - f_2^2)}, \\ \lambda_2 = \dfrac{f_1^2 - f_1^1}{(f_1^2 - f_1^1) + (f_2^1 - f_2^2)}. \end{cases}$$

对于一般具有 $p(p \geqslant 2)$个目标的情况，可以完全类似地求出.

首先，求出 p 个问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f_i(x), \quad i = 1, 2, \cdots, p, \\ \text{s.t.} \quad & x \in R \end{aligned}$$

的最优解，记为 $x^{(i)}$，$i = 1, 2, \cdots, p$.

令 $f_j^i = f_j(x^{(i)})$，$j = 1, 2, \cdots, p$；$i = 1, 2, \cdots, p$，设经过 p 个点$(f_1^i, f_2^i, \cdots, f_p^i)^{\mathrm{T}}$ $(i = 1, 2, \cdots, p)$的超平面方程为

$$\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots + \lambda_p f_p = \beta,$$

其中

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_p = 1.$$

于是有

$$\left.\begin{aligned} \sum_{j=1}^{p} \lambda_j f_j^i = \beta \\ \sum_{j=1}^{p} \lambda_j = 1 \end{aligned}\right\} \tag{5.4.8}$$

(5.4.8)是含有 $p+1$ 个变量 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p, \beta$ 及 $p+1$ 个方程的线性方程组. 当问题(5.2.1)不存在绝对最优解时，(5.4.8)有唯一的一组解，所解得的 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$ 就是所要求的权系数.

5.4.3 线性加权和法

对问题(5.2.1)中的 p 个目标函数 $f_1(x), f_2(x), \cdots, f_p(x)$，按其重要程度给予适当的权系数 $\lambda_i \geqslant 0$，$i = 1, 2, \cdots, p$，且 $\sum_{i=1}^{p} \lambda_i = 1$，然后构造评价函数 $h(x) = h(F(x)) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i f_i(x)$ 作为新的目标函数，再求解问题(5.4.1)，得最优解 x^*，以 x^* 作为原问题

(5.2.1)的最优解. 由于这种方法简单易行, 计算量小, 常在实际工作中采用.

下面将证明:

(1) 当 $\lambda_j>0\ (j=1,2,\cdots,p)$时, $h(\boldsymbol{F})$为严格单调增函数.

(2) 当 $\lambda_j\geqslant 0\ (j=1,2,\cdots,p)$时, $h(\boldsymbol{F})$为单调增函数.

证明 (1) $\lambda_j>0\ (j=1,2,\cdots,p)$, 且 $\boldsymbol{F}\leqslant\overline{\boldsymbol{F}}$, 所以

$$\lambda_j f_j<\lambda_j\bar{f}_j,\ j=1,2,\cdots,p. \tag{5.4.9}$$

由 $\boldsymbol{F}\leqslant\overline{\boldsymbol{F}}$ 可知: 至少存在某个 $j_0(1\leqslant j_0\leqslant p)$, 使

$$f_{j_0}<\bar{f}_{j_0},$$

于是

$$\lambda_{j_0}f_{j_0}<\lambda_{j_0}\bar{f}_{j_0}. \tag{5.4.10}$$

由(5.4.9)和(5.4.10), 可得

$$h(\boldsymbol{F})=\sum_{j=1}^{p}\lambda_j f_j<\sum_{j=1}^{p}\lambda_j\bar{f}_j=h(\overline{\boldsymbol{F}}).$$

(2) 因为 $\lambda_j\geqslant 0\ (j=1,2,\cdots,p)$, 且 $\boldsymbol{F}<\overline{\boldsymbol{F}}$, 所以

$$\lambda_j f_j\leqslant\lambda_j\bar{f}_j,\quad j=1,2,\cdots,p. \tag{5.4.11}$$

又因为 $\sum_{j=1}^{p}\lambda_j=1$, 所以至少存在某个 $j_0(1\leqslant j_0\leqslant p)$, 使 $\lambda_{j_0}>0$.

于是有

$$\lambda_{j_0}f_{j_0}<\lambda_{j_0}\bar{f}_{j_0}. \tag{5.4.12}$$

由(5.4.11)和(5.4.12)可得

$$h(\boldsymbol{F})=\sum_{j=1}^{p}\lambda_j f_j<\sum_{j=1}^{p}\lambda_j\bar{f}_j=h(\overline{\boldsymbol{F}}).$$

5.4.4 极小-极大法(min-max 法)

在对策论中, 作决策时常常要考虑在最不利的情况下找出一个最有利的策略方案, 这就是所谓的极小-极大法. 按照这种思想, 可以构造评价函数

$$h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))=\max_{1\leqslant j\leqslant p}\{f_j(\boldsymbol{x})\}.$$

然后求解问题

$$\min\quad h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))=\min_{\boldsymbol{x}\in R}\{\max_{1\leqslant j\leqslant p}f_j(\boldsymbol{x})\},$$

$$\text{s.t.}\quad \boldsymbol{x}\in R.$$

得最优解 $\boldsymbol{x}^*$, 以 $\boldsymbol{x}^*$ 作为问题(5.2.1)的最优解. 也可以选取一组适当的权系数 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$, 使它们满足 $\sum_{i=1}^{p}\lambda_i=1,\lambda_i\geqslant 0,\ i=1,2,\cdots,p$, 然后将评价函数定义为

$$h(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}))=\max_{1\leqslant j\leqslant p}\{\lambda_j f_j(\boldsymbol{x})\}.$$

5.4.5 乘除法

在问题(5.2.1)中, 设对任意 $\boldsymbol{x}\in R$, 各目标函数值均满足 $f_j(\boldsymbol{x})>0,\ j=1,2,\cdots,p$. 现将目标函数分为两类, 不妨设其分别为

$$f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}),\cdots,f_t(\boldsymbol{x})\to\min,$$

$$f_{t+1}(\boldsymbol{x}),f_{t+2}(\boldsymbol{x}),\cdots,f_p(\boldsymbol{x})\to\max,$$

则可构造评价函数

$$h(F(x))=\frac{\prod_{j=1}^{t}f_j(x)}{\prod_{j=t+1}^{p}f_j(x)}.$$

然后求解问题(5.4.1)，即可得到问题(5.2.1)的最优解.

5.5 逐步法(step method)

逐步法是一种迭代方法，在求解过程中的每一步，分析者把计算结果告诉决策者，决策者对计算结果作出评价，若认为满意，则迭代终止，否则分析者根据决策者的意见再重复计算，如此循环地进行，直到求得满意解为止. 这种方法主要是针对如下的多目标线性规划问题设计的：

$$\left.\begin{aligned}&\text{V-min}\quad F(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_p(x))^{\mathrm{T}},\\&\text{s.t.}\quad Ax\leqslant b,\\&\qquad\quad x\geqslant 0.\end{aligned}\right\}\tag{5.5.1}$$

其中，$f_i(x)=\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_j$，$i=1,2,\cdots,p$，$A=(a_{ij})_{m\times n}$，$b=(b_1,b_2,\cdots,b_m)^{\mathrm{T}}$.

令 $R=\{x\mid Ax\leqslant b,\ x\geqslant 0\}$，逐步法的计算步骤如下：

(1) 分别求解如下的 p 个单目标线性规划问题：

$$\left.\begin{aligned}&\min\quad f_i(x)=\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_j,\ i=1,2,\cdots,p,\\&\text{s.t.}\quad x\in R.\end{aligned}\right\}\tag{5.5.2}$$

设所得的最优解为 $x^{(i)}(i=1,2,\cdots,p)$，相应的最优值为 $f_i^*(i=1,2,\cdots,p)$. 令

$$f_i^M\triangleq\max_j\{f_i(x^{(j)})\}.$$

(2) 令

$$\alpha_i=\begin{cases}\dfrac{f_i^M-f_i^*}{f_i^*\left(\sum\limits_{j=1}^{n}c_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}}}, & f_i^*>0,\\[2ex]\dfrac{f_i^*-f_i^M}{f_i^*\left(\sum\limits_{j=1}^{n}c_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}}}, & f_i^*<0.\end{cases}\tag{5.5.3}$$

$$\lambda_i=\frac{\alpha_i}{\sum\limits_{j=1}^{p}\alpha_j},\quad i=1,2,\cdots,p.\tag{5.5.4}$$

由(5.3.3)和(5.3.4)易见

$$0\leqslant\lambda_i\leqslant 1.$$

其中，$i=1,2,\cdots,p$，$\sum_{i=1}^{p}\lambda_i=1$.

(3) 求出问题

$$
\left.\begin{array}{ll}
\min & t, \\
\text{s.t.} & [f_i(x)-f_i^*]\lambda_i \leqslant t, \quad i=1,2,\cdots,p, \\
& x\in R,\ t\geqslant 0
\end{array}\right\} \tag{5.5.5}
$$

的最优解 $x^{(1)}$ 及 $f_1(x^{(1)}), f_2(x^{(1)}), \cdots, f_p(x^{(1)})$.

(4) 将上面的计算结果 $x^{(1)}$ 及 $f_1(x^{(1)}), f_2(x^{(1)}), \cdots, f_p(x^{(1)})$ 告诉决策者，若决策者认为满意，则取 $x^{(1)}$ 为(5.5.1)的最优解，$F(x^{(1)})=(f_1(x^{(1)}), f_2(x^{(1)}), \cdots, f_p(x^{(1)}))^{\mathrm{T}}$ 为最优值，计算结束；否则由决策者把某个目标(例如第 j 个目标)的值提高 Δf_j(称之为宽容值)，则(5.3.5)中的约束集 R 应修改为 $R^{(1)}$，即令 $R=R^{(1)}$，其中

$$
R^{(1)}=\{x \mid x\in R, f_j(x)\leqslant f_j(x^{(1)})+\Delta f_j, f_i(x)\leqslant f_i(x^{(1)}),\ i=1,2,\cdots,p,\ i\neq j\},
$$

且 $\lambda_j=0$，再求解问题(5.5.5)，得最优解 $x^{(2)}$ 及 $f_1(x^{(2)}), f_2(x^{(2)}), \cdots, f_p(x^{(2)})$，这样继续迭代下去，直到求得一组决策者满意的解为止，由此可见这是一种人机交互式的方法.

习　题

1. 某厂生产 A, B 两种型号的摩托车，每辆车的利润分别为 100 元和 80 元. 平均生产时间分别为 3h 和 2h. 该厂每周生产时间为 120h，但可加班 48h，在加班时间内生产每辆车的利润分别为 90 元和 70 元. 市场每周需要 A, B 两种车各 30 辆以上，问应如何安排每周的生产计划，在尽量满足市场需要的前提下，使利润最大，而加班时间最少. 试建立数学模型.

2. 证明 $R_{pa}^* \cup \left\{\bigcup_{j=1}^{p} R_j^*\right\} \subset R_{wp}^*$.

3. 设多目标规划问题为

$$
\begin{array}{ll}
\text{V-min} & F(x)=(f_1(x), f_2(x))^{\mathrm{T}}, \\
\text{s.t.} & x\geqslant 0,\ x\in R.
\end{array}
$$

其中，

$$
f_1(x)=(x+2)^2+1,
$$

$$
f_2(x)=\begin{cases} 1-x, & x\leqslant 0, \\ 1, & 0\leqslant x\leqslant 1, \\ x, & x>1. \end{cases}
$$

求 $R_1^*, R_2^*, R_{wp}^*, R_{pa}^*, R^*$.

4. 求多目标规划问题

$$
\begin{array}{ll}
\text{V-min} & F(x)=(f_1(x), f_2(x))^{\mathrm{T}}, \\
\text{s.t.} & x_2+x_3=3, \\
& x_1+x_2+x_4=5, \\
& x_i\geqslant 0, \quad i=1,2,3,4
\end{array}
$$

在分层序列意义下的最优解，设 $f_1(x)$ 比 $f_2(x)$ 重要，其中

$$
f_1(x)=-2x_1-x_2,\ f_2(x)=-x_1.
$$

5. 用乘除法求解多目标规划问题

$$
\begin{array}{ll}
\max & f_1(x)=2x_1+x_2, \\
\min & f_1(x)=x_1-x_2, \\
\text{s.t.} & x_1+x_2\leqslant 8, \\
& x_1-x_2\leqslant 4, \\
& x_1\geqslant 1, x_2\geqslant 0.
\end{array}
$$

6. 用线性加权法求解多目标规划问题

$$
\begin{aligned}
\text{V-min} \quad & \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}, \\
\text{s.t.} \quad & 3x_1+8x_2\leqslant 12, \\
& x_1+\ \ x_2\leqslant 3, \\
& 0\leqslant x_1\leqslant 1.5,\ x_2\geqslant 0.
\end{aligned}
$$

其中，$f_1(\boldsymbol{x})=2x_1-7x_2$，$f_2(\boldsymbol{x})=-6x_1-x_2$，$\lambda_1=2/3$，$\lambda_2=1/3$.

第6章 动态规划

动态规划(dynamic programming)是解决多阶段决策过程最优化问题的一种方法. 1951年, 美国数学家贝尔曼(R. Bellman)研究了一类多阶段问题的特征, 提出了解决这类问题的基本原理, 于1957年发表了《动态规划》.

动态规划把比较复杂的问题划分为若干阶段, 通过逐段求解, 最终求得全局最优解. 这种"分而治之, 逐步改善"的方法已在一些较难解决的问题, 尤其是在离散性问题中, 显示出优越性.

6.1 多阶段决策问题与动态规划

6.1.1 多阶段决策问题

多阶段决策问题是指具有如下特点的过程: 该过程可以划分为若干个互相联系的阶段, 在每一个阶段都需要从一组可供选择的候选方案中作出决策, 选出一个决策方案, 而一个阶段的决策确定后, 将会影响以后各阶段的活动及其决策. 在每个阶段的决策都确定之后, 整个过程也随之确定. 把每个阶段的决策综合在一起, 构成一个贯穿整个过程始终的决策序列, 称之为一个策略. 而对应于每一个策略, 都会产生一个相应的结果. 多阶段决策优化问题, 就是要通过对每一阶段的决策从所有可行的策略中寻找最终结果最佳的策略.

多阶段决策问题, 不论其本身是否与时间有关, 由于是分阶段来依次解决, 便具有了明显的时序性, 而在各阶段中所采取的决策是随阶段而变动的, 不同阶段采取不同决策, 这便是"动态"的含义. 阶段往往可以用时段表示, 但动态规划在一定条件下也可以解决一些与时间无关的静态规划中的最优化问题, 只要人为地引入"时段"因素, 就可以将其转化为一个多阶段决策问题.

例 6.1 最短路线问题 某个旅行者计划用3天时间从 A 地走到 D 地: 第一天从 A 走到某个 B_i 休息, 第二天从该 B_i 走到某个 C_i 休息, 第三天从该 C_i 到达目的地 D. 该地区的交通线路及各段的里程见图 6.1. 试求从 A 到 D 的最短路线.

在例 6.1 中, 整个旅程可分为3个阶段(每天划为一个阶段), 每阶段初都需要作出决策: 在可供选择的几条路中, 应选择哪一条路; 阶段末(晚上)在何处休息, 这就构成了一个多阶段决策问题.

6.1.2 动态规划的基本概念

多阶段决策问题可以通过建立线性或非线性规划模型来求解, 但是最常用的有效方法是动态规划方法. 动态规划处理问题的方法与线性、非线性规划有很大的不同, 独具特色.

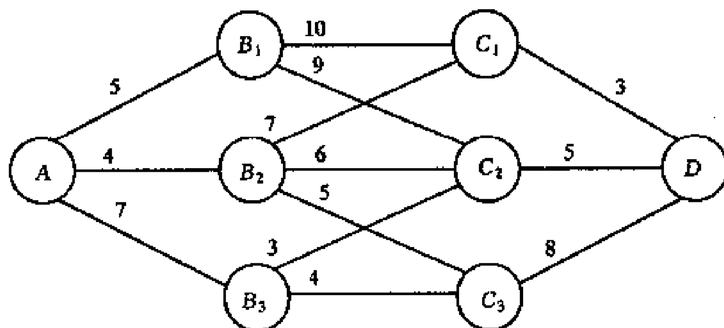


图 6.1

下面先介绍动态规划的一些基本概念.

(1) **阶段** 多阶段决策问题的全过程所划分的若干个相对独立的可排列成序列的部分，称为阶段，通常用变量 k 表示，$k=1,2,\cdots,n$.

(2) **状态** 指系统在 k 阶段初始时刻可能出现的客观自然情况，通常用变量 x_k 表示. 在例 6.1 中，第 k 阶段(第 k 天)出发时旅行者所在的出发地点即为该阶段的状态.

(3) **决策与策略** 从第 k 阶段某状态 x_k 出发，所采取的本阶段的行动方案或措施称为决策，通常用 $u_k(x_k)$表示. 在例 6.1 中，第 2 天从地点 B_1 出发时，决定选择向 C_2 前进，亦即第 2 阶段状态 x_2 为 B_1 时，选择的决策为路线$\overline{B_1C_2}$，可表示为 $u_2(B_1)=C_2$.

而策略则是由各阶段的决策按先后顺序所构成的一个决策序列. 例如，若第 1 阶段决策为 B_1，第 2 阶段决策为 C_1，第 3 阶段决策为 D，则该策略为

$$\{u_1(A)=B_1,\ u_2(B_1)=C_2,\ u_3(C_2)=D\}.$$

(4) **状态转移律** 从第 k 阶段的状态 x_k 出发，采取决策 u_k 之后，得到第 $k+1$ 阶段状态 x_{k+1}，其中所体现的状态 x_{k+1}，x_k 及决策 u_k 之间的关系和规律可记为

$$x_{k+1}=T(x_k,u_k). \tag{6.1.1}$$

状态转移律通常表现为表格或等式的形式. 当状态转移律以等式表现时，又称之为状态转移方程.

(5)指标函数可分为阶段指标函数和过程指标函数.

① **阶段指标函数** 是从第 k 阶段某状态 x_k 出发，当采用决策 u_k 时所产生的效果(如路程、费用、利润和时间等)的值，通常记为 r_k. 显然

$$r_k=r_k(x_k,u_k). \tag{6.1.2}$$

② **过程指标函数** 是指从第 k 阶段某状态 x_k 出发，采用某种策略 $\{u_k,u_{k+1},\cdots,u_n\}$，直到过程终结所产生的整体效果(路程、费用、利润和时间等)的值，通常以 R_k 表示. 显然

$$R_k=R_k(u_k,u_{k+1},\cdots,u_n)=Y(r_k,r_{k+1},\cdots,r_n). \tag{6.1.3}$$

R_k 最常见的两种形式为

$$R_k=\sum_{j=k}^{n}r_j(x_j,u_j) \tag{6.1.4}$$

或

$$R_k=\prod_{j=k}^{n}r_j(x_j,u_j). \tag{6.1.5}$$

当 $k\neq1$ 时，R_k 称为k 子过程指标函数；当 $k=1$ 时，R_1 即全过程指标函数，简记为 R.

(6) **最优化原理** 求解动态规划问题的基本原理是：作为整个过程的最优策略具有这

样的性质，即无论过去的状态和决策如何，对前面所形成的状态而言，余下的诸决策必构成对应的子过程上的最优策略．这一表述通常称为动态规划的最优化原理．

(7) **动态规划的基本方程** 根据最优化原理写出的子过程最优指标函数之间的递推关系式称为动态规划基本方程，是计算动态规划问题的出发点．记第 k 阶段从状态 x_k 出发的最优子策略的 k 子过程指标函数值为 $f_k(x_k)$，那么，当

$$R_k = \sum_{j=k}^{n} r_j(x_j, u_j).$$

有

$$f_k(x_k) = \underset{u_k}{\mathrm{opt}}\{r_k(x_k, u_k) + f_{k+1}(x_{k+1})\}. \tag{6.1.6}$$

当

$$R_k = \prod_{j=k}^{n} r_j(x_j, u_j),$$

有

$$f_k(x_k) = \underset{u_k}{\mathrm{opt}}\{r_k(x_k, u_k) \cdot f_{k+1}(x_{k+1})\}. \tag{6.1.7}$$

其中，“opt”意为“最优化”，常取为“max”或“min”．此外，通常还应有边界条件：

$$f_{n+1}(x_{n+1}) = C, \quad C\ 是常数. \tag{6.1.8}$$

多数情况下，当(6.1.6)成立时，取 $C=0$；当(6.1.7)成立时，取 $C=1$．

6.2 动态规划模型与求解

6.2.1 动态规划模型

动态规划的数学模型由以下 6 部分构成：

(1) 将问题的过程划分为若干个阶段；

(2) 定义状态变量，确定各阶段的状态变量集合；

(3) 定义决策变量，确定各阶段的允许决策变量集合；

(4) 确定状态转移律；

(5) 定义阶段指标函数以及过程指标函数的结构；

(6) 确定基本方程及其边界条件．

根据上面的讨论，例 6.1 中旅行者最短路线问题的动态规划模型如下．

(1) 阶段划分：每天为一个阶段，共 3 个阶段，即阶段变量取值为 $k=1,2,3$．

(2) 状态变量及状态集合：以每天的出发点为状态，$x_1=\{A\}$，$x_2=\{B_1, B_2, B_3\}$，$x_3=\{C_1, C_2, C_3\}$．

(3) 决策变量取为当天前进的目的地，于是决策变量及允许决策集合为

$$u_1(A)\in\{B_1,B_2,B_3\},\ u_2(B_1)\in\{C_1,C_2\},$$

$$u_2(B_2)\in\{C_1,C_2,C_3\},\ u_2(B_3)\in\{C_2,C_3\},\ u_3(C_j)\in\{D\},\quad j=1,2,3.$$

(4) 状态转移方程：前一天选择的目的地即第二天的出发地，所以

$$x_{k+1} = u_k(x_k), \quad k=1,2,3. \tag{6.2.1}$$

(5) 指标函数：因为阶段指标函数 r_k 为第 k 天所经过的路程，由于出发点为 x_k，目的点为 u_k，记 x_k 与 u_k 的距离为 $\overline{x_k u_k}$，故有

$$r_k = \overline{x_k u_k},\ R_k = \sum_{j=k}^{3} r_j. \tag{6.2.2}$$

(6) 基本方程与边界条件：本问题是求最短路线，应取“opt”为“min”，故有

$$\left.\begin{aligned} & f_k(x_k)=\min_{u_k}\{r_k(x_k,u_k)+f_{k+1}(x_{k+1})\},\ k=3,2,1,\\ & f_4(x_4)=0, \end{aligned}\right\} \tag{6.2.3}$$

即

$$\left.\begin{aligned} & f_k(x_k)=\min_{u_k}\{r_k(x_k,u_k)+f_{k+1}(x_{k+1})\},\ k=3,2,1,\\ & f_4(D)=0. \end{aligned}\right\} \tag{6.2.4}$$

6.2.2 动态规划的求解

动态规划的通常解法是利用基本方程所提供的递推关系式逆序地逐段求解，即先利用边界条件，将 $f_n(x_n)$化成关于 $u_n(x_n)$的最优化问题，获得第 n 阶段当状态为x_n 时的最优决策 $u_n(x_n)$以及 $f_n(x_n)$的值；然后再利用 $f_n(x_n)$的值求第 $n-1$ 阶段状态为 x_{n-1}时的最优决策 $u_{n-1}(x_{n-1})$，以及 $f_{n-1}(x_{n-1})$……如此继续下去，直到得到第一阶段状态 x_1 时的最优决策 $u_1(x_1)$以及 $f_1(x_1)$，则决策序列$\{u_1(x_1),\ u_2(x_2),\cdots,u_n(x_n)\}$即为最优策略，而 $f_1(x_1)$即最优策略所对应的指标函数值.

现以例 6.1 的动态规划模型求解为例具体说明逆序求解的过程. 为了便于表述，以下记第 k 阶段状态x_k 时的最优决策为$u_k^*(x_k)$.

对于 $k=3$，由(6.2.1)，(6.2.3)及(6.2.4)，有

$$f_3(C_1)=\min_{u_3=D}\{\overline{C_1D}+f_4(D)\}=\min\{3+0\}=3,\quad u_3^*(C_1)=D,$$

$$f_3(C_2)=\min_{D}\{\overline{C_2D}+f_4(D)\}=\min\{5+0\}=5,\quad u_3^*(C_2)=D,$$

$$f_3(C_3)=\min_{D}\{\overline{C_3D}+f_4(D)\}=\min\{8+0\}=8,\quad u_3^*(C_3)=D;$$

对于 $k=2$，有

$$f_2(B_1)=\min\begin{Bmatrix}\overline{B_1C_1}+f_3(C_1)\\ \overline{B_1C_2}+f_3(C_2)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}10+3\\ 9+5\end{Bmatrix}=13,\quad u_2^*(B_1)=C_1,$$

$$f_2(B_2)=\min\begin{Bmatrix}\overline{B_2C_1}+f_3(C_1)\\ \overline{B_2C_2}+f_3(C_2)\\ \overline{B_3C_3}+f_3(C_3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}7+3\\ 6+5\\ 4+8\end{Bmatrix}=10,\quad u_2^*(B_2)=C_1,$$

$$f_2(B_3)=\min\begin{Bmatrix}\overline{B_3C_2}+f_3(C_2)\\ \overline{B_3C_3}+f_3(C_3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}3+5\\ 4+8\end{Bmatrix}=8,\quad u_2^*(B_3)=C_2;$$

对于 $k=1$，有

$$f_1(A)=\min\begin{Bmatrix}\overline{AB_1}+f_2(B_1)\\ \overline{AB_2}+f_2(B_2)\\ \overline{AB_3}+f_3(B_3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}5+13\\ 4+10\\ 7+8\end{Bmatrix}=14,\quad u_2^*(A)=B_2.$$

计算结束，现可顺序求出最优策略(最短路线)：

$$u_1^*(A)=B_2\to u_2^*(B_2)=C_1\to u_3^*(C_1)=D,$$

即由 A 到 D 的最短路线是

$$A\xrightarrow{4}B_2\xrightarrow{7}C_1\xrightarrow{3}D.$$

从而 A 到 D 的最短路线的长度为$f_1(A)=14$.

在用动态规划方法求解最短路线问题时，可以采用“标号法”直接将第 k 阶段状态 x_k 的最优值函数 $f_k(x_k)$ 标在状态点 x_k 上方的方框内．并且，若该阶段的最优决策为

$$u_k^*(x_k)=x_{k+1},$$

就将对应的两点 x_k 和 x_{k+1} 之间的连线画成粗实线．如图 6.2 所示：$f_3(C_1)=3$，就在点 C_1 上方的方框内填上数字 3，并将线段 C_1D 描成粗实线；$f_2(B_2)=10$，且 $u_2^*(B_2)=C_1$，就将数字 10 填入点 B_2 上方的方框内，同时将线段 B_2C_1 画粗……这样，当图上所有点上方的框内都填上数字后，从该点到终点的粗实线即为从该点到终点的最短路线，而点上方的框内的数字即为从该点到终点的最短路线的长度．

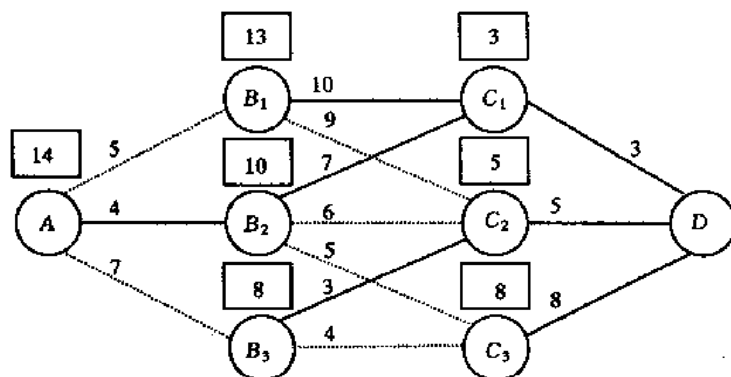


图 6.2

6.3 动态规划应用举例

与线性规划模型和非线性规划模型相比较，动态规划模型的建立更依赖于个人的经验与技巧，如何正确定义状态变量及找出基本方程，是一个较困难的问题．本书仅提供几个常见例子，使读者对动态规划模型有所了解，读者应进一步从各个渠道了解动态规划应用案例，并尽可能地在实践中应用动态规划方法．

例 6.2　资源最优配置问题　某公司准备用 50 万元对 3 个下属厂进行技术改造．各厂所需资金及投资效益见表 6.1．问应如何分配这笔资金，使投资总效益最大？

解　首先建立本问题的动态规划模型．

(1) 阶段划分：整个投资过程可视为先确定对工厂 1 的投资额，再确定对工厂 2 的投资额，最后确定对工厂 3 的投资额．这样，投资过程可划分为 3 个阶段，第 k 阶段即为对工厂 k 投资，$k=1,2,3$．

(2) 状态变量：设在对工厂 k 投资时所能支配的资金数额为状态变量 x_k．显然，$x_1=50$，$0\leqslant x_k\leqslant 50$，$k=2,3$．

(3) 决策变量：第 k 阶段所确定的对工厂 k 的投资额 u_k 为决策变量．根据表 6.1，$u_1=0,10,20$，$u_2=0,20,30,40$，$u_3=0,10$，且满足 $0\leqslant u_k\leqslant x_k$，$k=1,2,3$．

表 6.1

投资额/万元	技改后年增利润额/万元		
	工厂 1	工厂 2	工厂 3
0	0	0	0
10	15	—	13
20	26	28	—
30	—	39	—
40	—	42	—

(4) 状态转移方程：在准备对工厂 k 投资时，所能支配的资金减去对工厂 k 的投资后，剩下的资金即是对工厂 $k+1$ 投资时所能支配的资金，故

$$x_{k+1}=x_k-u_k.$$

(5) 指标函数：表 6.1 中所列的年增利润额即为相应的阶段指标（利润）函数值 $r_k(x_k,u_k)$，且过程指标函数为

$$R_k=\sum_{j=k}^{3}r_j(x_j,u_j).$$

(6) 基本方程及边界条件：

$$\begin{cases}f_k(x_k)=\max\limits_{u_k}\{r_k(x_k,u_k)+f_{k+1}(x_{k+1})\}, & k=3,2,1,\\ f_4(x_4)=0.\end{cases}$$

例 6.2 的求解过程如下：

对于 $k=3$，$u_3(0)=0$，$u_3(j)\in\{0,10\}$，$j=10,20,30,40$，有

$$f_3(0)=\max\{r_3(0,0)+f_4\}=0+0=0,\quad u_3^*(0)=0;$$

$$f_3(j)=\max\{r_3(j,0)+f_4,r_3(j,10)+f_4\}=\max\{0+0,13+0\}=13,$$

$$u_3^*(j)=10,\quad j=10,20,30,40,50.$$

对于 $k=2$，$u_2(0)=u_2(10)=0$，$u_2(i)=j$，$i=20,30,40,50$，$j=0,20,30,40$，$j\leqslant i$，有

$$f_2(0)=\max\{r_2(0,0)+f_3(0)\}=0+0=0,\quad u_2^*(0)=0;$$

$$f_2(10)=\max\{r_2(10,0)+f_3(10)\}=0+13=13,\quad u_2^*(10)=0;$$

$$\begin{aligned}f_2(20)&=\max\{r_2(20,0)+f_3(20),r_2(20,20)+f_3(0)\}\\&=\max\{0+13,28+0\}=28,\quad u_2^*(20)=20;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f_2(30)&=\max\{r_2(30,0)+f_3(30),r_2(30,20)+f_3(10),r_2(30,30)+f_3(0)\}\\&=\max\{0+13,28+13,39+0\}=41,\quad u_2^*(30)=20;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f_2(40)&=\max\{r_2(40,0)+f_3(40),r_2(40,20)+f_3(20),r_2(40,30)+f_3(10),\\&\quad r_2(40,40)+f_3(0)\}\\&=\max\{0+13,28+13,39+13,42+0\}=52,\quad u_2^*(40)=30;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f_2(50)&=\max\{r_2(50,0)+f_3(50),r_2(50,20)+f_3(30),r_2(50,30)+f_3(20),\\&\quad r_2(50,40)+f_3(10)\},\\&=\max\{0+13,28+13,39+13,42+13\}=55,\quad u_2^*(50)=40;\end{aligned}$$

对于 $k=1$，$x_1=50$，$u_1(50)=0,10,20$，有

$$f_1(50)=\max\{r_1(50,0)+f_2(50),r_1(50,10)+f_2(40),r_2(50,20)+f_2(30)\}$$
$$=\max\{0+55,15+52,26+41\}=67,\quad u_1^*(50)=10\text{ 或 }20.$$

从上面计算结果可知，最优投资方案有两个.

方案Ⅰ：$u_1^*(50)=10\to u_2^*(40)=30\to u_3^*(10)=10$，即对工厂 1,2,3 的投资依次为 10，30，10 万元，年新增利润依次为 15，39，13 万元，合计 67 万元.

方案Ⅱ：$u_1^*(50)=20\to u_2^*(30)=20\to u_3^*(10)=10$，即对工厂 1,2,3 的投资依次为 20，20，10 万元，年新增利润依次为 26,28,13 万元，合计 67 万元.

例 6.3　设备更新问题　一台设备的价格为 P，运行寿命为 n 年，每年的维修费用是设备役龄的函数，记为 $C(t)$，新设备的役龄为 $t=0$. 旧设备出售的价格是设备役龄的函数，记为 $S(t)$. 在 n 年末，役龄为 t 的设备残值为 $R(t)$. 现有一台役龄为 T 的设备，在使用过程中，使用者每年都面临“继续使用”或“更新”的策略.

阶段 k：运行年份；

状态变量 x_k：设备的役龄 t；

决策变量 u_k：

$$u_k=\begin{cases}R, & \text{(Replace)更新},\\ K, & \text{(Keep)继续使用}.\end{cases}$$

状态转移方程为

$$x_{k+1}=\begin{cases}1, & u_k=R,\\ x_k+1, & u_k=K.\end{cases}$$

阶段指标为

$$r_k=\begin{cases}P+C(0)-S(x_k), & u_k=R,\\ C(x_k), & u_k=K\end{cases}=\begin{cases}P+C(0)-S(t), & u_k=R,\\ C(t), & u_k=K.\end{cases}$$

递推方程为

$$f_k(x_k)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(x_k)+f_{k+1}(x_{k+1})\\ C(x_k)+f_{k+1}(x_{k+1})\end{Bmatrix}\begin{matrix}u_k=R,\\ u_k=K.\end{matrix}$$
$$=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(t)+f_{k+1}(1)\\ C(t)+f_{k+1}(t+1)\end{Bmatrix}\begin{matrix}u_k=R,\\ u_k=K.\end{matrix}$$

终端条件为

$$f_n(t)=R(t).$$

具体数据见表 6.2.

表 6.2

t	0	1	2	3	4	5	6	7
$C(t)$	10	13	20	40	70	100	100	—
$S(t)$	—	32	21	11	5	0	0	0
$R(t)$	—	25	17	8	0	0	0	0

且

$$n=5,\ T=2,\ P=50.$$

由表 6.2 开始，终端条件为

$f_6(1)=-25$，$f_6(2)=-17$，$f_6(3)=-8$，$f_6(5)=f_6(6)=f_6(7)=0$.

对于 $k=5$，有

$$f_5(t)=\min\begin{cases}P+C(0)-S(t)+f_6(1) & u_5=R,\\ C(t)+f_6(t+1) & u_5=K;\end{cases}$$

$$f_5(1)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(1)+f_6(1)\\ C(1)+f_6(2)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-32+(-25)\\ 13+(-17)\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}3\\ -4\end{Bmatrix}=-4,\quad u_5^*=K;$$

$$f_5(2)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(2)+f_6(1)\\ C(2)+f_6(3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-21+(-25)\\ 20+(-8)\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}14\\ 12\end{Bmatrix}=12,\quad u_5^*=K;$$

$$f_5(3)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(3)+f_6(1)\\ C(3)+f_6(4)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-11+(-25)\\ 40+0\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}24\\ 40\end{Bmatrix}=24,\quad u_5^*=R;$$

$$f_5(4)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(4)+f_6(1)\\ C(4)+f_6(5)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-5+(-25)\\ 70+0\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}30\\ 70\end{Bmatrix}=30,\quad u_5^*=R;$$

$$f_5(5)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(5)+f_6(1)\\ C(5)+f_6(6)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-0+(-25)\\ 100+0\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}35\\ 100\end{Bmatrix}=35,\quad u_5^*=R;$$

$$f_5(6)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(6)+f_6(1)\\ C(6)+f_6(7)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-0+(-25)\\ 100+0\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}35\\ 100\end{Bmatrix}=35,\quad u_5^*=R.$$

对于 $k=4$，有

$$f_4(t)=\min\begin{cases}P+C(0)-S(t)+f_5(1) & u_4=R,\\ C(t)+f_5(t+1) & u_4=K;\end{cases}$$

$$f_4(1)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(1)+f_5(1)\\ C(1)+f_5(2)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-32+(-4)\\ 13+12\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}24\\ 25\end{Bmatrix}=24,\quad u_4^*=R;$$

$$f_4(2)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(2)+f_5(1)\\ C(2)+f_5(3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-21+(-4)\\ 20+24\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}35\\ 44\end{Bmatrix}=35,\quad u_4^*=R;$$

$$f_4(3)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(3)+f_5(1)\\ C(3)+f_5(4)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-11+(-4)\\ 40+30\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}45\\ 70\end{Bmatrix}=45,\quad u_4^*=R;$$

$$f_4(4)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(4)+f_5(1)\\ C(4)+f_5(5)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-5+(-4)\\ 70+35\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}51\\ 105\end{Bmatrix}=51,\quad u_4^*=R;$$

$$f_4(5)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(5)+f_5(1)\\ C(5)+f_5(6)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-0+(-4)\\ 100+35\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}56\\ 135\end{Bmatrix}=56,\quad u_4^*=R.$$

对于 $k=3$，有

$$f_3(t)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(t)+f_4(1) & u_3=R,\\ C(t)+f_4(t+1) & u_3=K;\end{Bmatrix}$$

$$f_3(1)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(1)+f_4(1)\\ C(1)+f_4(2)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-32+24\\ 13+35\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}52\\ 48\end{Bmatrix}=48,\quad u_3^*=K;$$

$$f_3(2)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(2)+f_4(1)\\ C(2)+f_4(3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-21+24\\ 20+45\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}63\\ 65\end{Bmatrix}=63,\quad u_3^*=R;$$

$$f_3(3)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(3)+f_4(1)\\ C(3)+f_4(4)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-11+24\\ 40+51\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}73\\ 91\end{Bmatrix}=73,\quad u_3^*=R;$$

$$f_3(4)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(4)+f_4(1)\\ C(4)+f_4(5)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-5+24\\ 70+56\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}79\\ 126\end{Bmatrix}=79,\quad u_3^*=R.$$

对于 $k=2$，有

$$f_2(t)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(t)+f_3(1) & u_2=R,\\ C(t)+f_3(t+1) & u_2=K;\end{Bmatrix}$$

$$f_2(1)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(1)+f_3(1)\\ C(1)+f_3(2)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-32+48\\ 13+63\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}76\\ 76\end{Bmatrix}=76,\quad u_2^*=K\text{ 或者 }u_2^*=R;$$

$$f_2(2)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(2)+f_3(1)\\C(2)+f_3(3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-21+48\\20+73\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}87\\93\end{Bmatrix}=87,\quad u_2^*=R;$$

$$f_2(3)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(3)+f_3(1)\\C(3)+f_3(4)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-11+48\\40+79\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}97\\119\end{Bmatrix}=73,\quad u_2^*=R.$$

对于 $k=1$,有

$$f_1(t)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(t)+f_2(1)\\C(t)+f_2(t+1)\end{Bmatrix}\quad \begin{matrix}u_1=R,\\u_1=K;\end{matrix}$$

$$f_1(2)=\min\begin{Bmatrix}P+C(0)-S(2)+f_2(1)\\C(2)+f_2(3)\end{Bmatrix}=\min\begin{Bmatrix}50+10-21+76\\20+97\end{Bmatrix}$$

$$=\min\begin{Bmatrix}115\\117\end{Bmatrix}=115,\quad u_1^*=R.$$

由以上计算可知,本问题有两个决策,它们对应的最小费用都是 115. 两个决策见表 6.3.

表 6.3

年　份	1	2	3	4	5
决策 1	更新	更新	继续	更新	继续
决策 2	更新	继续	更新	更新	继续

习　题

1. 某科研项目由 3 个小组用不同的手段研究,他们失败的概率为 0.4, 0.6, 0.8. 为了减少 3 个小组都失败的可能性,现决定给 3 个小组中增派两名高级科学家,到各小组后,各小组科研项目失败概率见表 6.4.问如何分派科学家才能使 3 个小组都失败的概率,即科研项目最终失败的概率最小?

表 6.4

高级科学家数	小　组		
	1	2	3
0	0.40	0.60	0.80
1	0.20	0.40	0.50
2	0.15	0.20	0.30

2. 某牧场有资金 15000 元,用来买 A,B 两种牛. 每花 1000 元买 A,B 牛后,当年及以后每年各可出生 2,3 头小牛,且当年各获利 500, 200 元;以后每年用按此比例的资金继续买牛. 问今后 4 年应如何买牛才能使第 4 年末的牛群最大?

3. 某工厂有三种产品准备参加展销,各产品质量与利润关系见表 6.5. 展销品运输车运送总质量不能超过 6t, 问应该怎样安排参展,才能使总利润最大?

表 6.5

产品种类	1	2	3
质　量	2	3	4
利　润	80	130	180

4. 用动态规划解非线性规划问题

$$\begin{aligned}\max\quad & Z=7x_1^2+6x_1+5x_2^2,\\ \text{s.t.}\quad & x_1+\ x_2\leqslant 10,\\ & x_1-3x_2\leqslant 9,\\ & x_1,\quad x_2\geqslant 0.\end{aligned}$$

5. 用动态规划解问题

$$\begin{aligned}\max\quad & Z=8x_1+7x_2,\\ \text{s.t.}\quad & 2x_1+\ x_2\leqslant 10,\\ & 5x_1+2x_2\leqslant 15,\\ & x_1,x_2\text{为非负整数}.\end{aligned}$$

6. 某厂生产一批机械设备，根据市场调查，今后4个时期该产品需求量依次为2，3，2，4台，该厂每期最大生产能力为6台，每期生产固定费用为3万元，若不生产，则固定费用为0元，单台成本1万元，每期贮存保养费为每台0.5万元，若第1期初和第4期末无库存，试确定各期产量，使总费用最少.

第7章 蒙特卡罗方法

蒙特卡罗(Monte-Carlo)方法是一种利用重复的统计实验求解物理和数学问题的方法，它是在20世纪40年代中期随着科学技术发展，特别是核武器研制和电子计算机发明而提出的，这类问题可以直接或间接地用一个随机过程描述，蒙特卡罗方法就是设法模拟这个过程.

7.1 基本原理和方法

7.1.1 蒙特卡罗方法的基本原理

在对大量的研究对象进行调查分析时，有两种基本方法：普查与随机抽样. 穷举法就是对所有研究对象进行普查，其优点是结论完全可靠，但工作量大，适用于较小规模问题. 而当问题的规模很大时，通常应采用随机抽样，对随机抽取的样本点进行研究，由样本点的性质来推断原问题全面的性质，这样处理的工作量相对较小，可操作性强，只要随机抽样得当，结论的可靠性就可以得到保证.

用蒙特卡罗优化方法处理问题，其解答往往是构造某事件出现的概率或某个随机变量的数学期望，在计算机上通过某种用数字进行的假想"试验"，得到这种事件出现的频率或者这个随机变量具体取值的算术平均值，并用它作为问题的近似解.

利用蒙特卡罗优化方法的思想建立模型，采用Matlab语言编程，在计算机上进行模拟试验，能够解决非线性规划的寻优等实际问题.

7.1.2 随机数产生原理

用蒙特卡罗方法求解一个问题时，基本工具就是一组数据，称为随机数. 可以用一组随机数来代替某些随机过程中的变数. 当然，这组随机数与随机过程中的变数应具有相同的统计性质，同时，随机数的来源原则上应该是无止境的，并且数与数之间也应当是相互独立、不具任何关联的，否则随机数就不"随机"了，而变成有规律可循的"规律"数了. 由于计算机中的随机数是用确定法则获得的，因而称之为伪随机数. 由"伪"通"真"，理论上非常深入，同时也是评价方法优劣的权重.

产生随机数是蒙特卡罗方法的基础. 近年来国际上热门的一些新方法包括线性同余法、非线性同余法、Fibonacci序列、Tausworthe序列、进位加-借位减发生器法，以及乘子和增量也在递推中变化的复合素数发生器和基于混沌映射产生随机数的方法，特别是构造优良的组合发生器. 比较有影响的是关于混沌映射和组合发生器.

An研究了混沌映射(chaotic mapping)产生随机数的方法. 使用递推式

$$y_{i+1}=\begin{cases}(3/2)y_i+1/4, & 0\leqslant y_i<1/2,\\(1/2)y_i-1/4, & 1/2\leqslant y_i<1.\end{cases}$$

并指出此递推式可产生周期趋于无穷的序列，其经验分布的极限分布为

$$F(y)=(Ln(y+1/2)+Ln2)/Ln3).$$

根据产生随机数中的概率理论，若随机变量 η 的分布函数为$F(y)$，则 $\xi=F(\eta)$服从 $U(0,1)$均匀分布. 于是由

$$x_i=Ln(y_i+1/2)/Ln3$$

得到的序列$\{x_i\}$可看作有 $U(0,1)$分布的随机序列. 因随机序列$\{y_i\}$是无限不循环的，所以上述方法可以产生周期为无限的 $U(0,1)$均匀分布的随机序列.

组合发生器的两个重要理论成果来自 Deng-George 和杨自强、张正军的推广形式.

定理 7.1 设 $x^{(1)}, x^{(2)},\cdots,x^{(m)}$是区间(0, 1)上的独立随机变量，$c_1,c_2,\cdots,c_m$ 是常数，又设 $x=\left(\sum_{j=1}^{m}c_jx^{(j)}\right)\mathrm{mod}1$，若 $x^{(1)}\sim U(0,1)$，且 c_1 是整数，则 $x\sim U(0,1)$.

定理 7.2 设 $x^{(1)},x^{(2)},\cdots,x^{(m)}$是区间(0, 1)上的独立随机变量，其密度函数分别为 $f_1(x_1),f_2(x_2),\cdots,f_m(x_m)$，又设 $c_1,c_2,\cdots,c_m$ 是整数，$x=\left(\sum_{j=1}^{m}c_jx^{(j)}\right)\mathrm{mod}1$，$x$ 的密度函数记为$f(x)$，若$|f_j(x_j)-1|\leqslant\varepsilon_j$，$j=1,2,\cdots,m$，则 $|f(x)-1|\leqslant\prod_{j=1}^{m}\varepsilon_j$. 进而有 $x\xrightarrow{P}U(0.1)$，若$\prod_{j=1}^{m}\varepsilon_j\to0$.

定理 7.2 意味着几个独立且近似均匀的随机变量的线性组合也是一个近似均匀的随机变量，但其分布比组成它的任何一个变量更接近 $U(0,1)$均匀分布.

7.2 基本方法和流程图

设问题为

$$\min\quad f(x),$$
$$\text{s.t.}\quad x\in D.$$

蒙特卡罗方法的算法步骤是：

(1) 预置 L 为充分大的正数，确定选点个数 M.

(2) 用随机函数及条件限制产生可行点 x.

(3) 计算目标函数：$F=f(x)$.

(4) 比较函数值：若 $F\geqslant L$，转(6)；否则，转(5).

(5) 记录当前最优点的信息：$L=F,\bar{x}=x$.

(6) 若已选完 M 个可行点，输出 $\bar{x}$ 和L；否则，转(2)，寻找下一个可行点.

蒙特卡罗方法的算法流程见图 7.1.

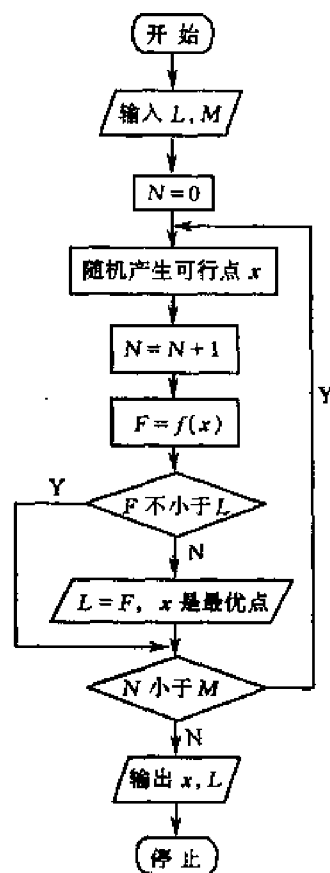


图 7.1

7.3 约束条件的处理

对同一个约束优化问题，其构成可行域的约束条件可以有多种等价的形式，但是在利用蒙特卡罗优化方法编制程序时，约束条件的不同表达形式将对程序的难易程度及计算效

率产生直接影响. 因此，应根据约束的类型对原问题的约束条件作相应的处理.

7.3.1 不等式约束情形

随机函数 rand(1)产生的是均匀分布的随机的正的纯小数，但一般的优化问题的变量的取值范围往往不是[0, 1]区间，例如是

$$a \leqslant x \leqslant b, \tag{7.3.1}$$

这时，可作一个从[0, 1]区间到[a, b]区间的映射，令

$$x = a + (b - a) * \text{rand}(1), \tag{7.3.2}$$

这样就可以产生[a, b]区间上的随机数.

对于一般的不等式，也应尽可能先化为类似于(7.3.1)的形式，再按(7.3.2)的形式编制程序，可以大大简化程序.

例 7.1

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = 3x_1^2 - 4x_2^2 + 5x_1x_2, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - x_2^2 \leqslant 9, \\ & x_1x_2 + x_3 \leqslant 7, \\ & 3x_1 + x_2 - x_3 \leqslant 5, \\ & -9 \leqslant x_2 \leqslant 4, \\ & x_1 \geqslant 0. \end{aligned}$$

可以将约束条件改写为等价形式，有

$$\begin{aligned} \text{s.t.} \quad & -9 \leqslant x_2 \leqslant 4, \\ & 0 \leqslant x_1 \leqslant x_2^2 + 9, \\ & 3x_1 + x_2 - 5 \leqslant x_3 \leqslant 7 - x_1x_2. \end{aligned}$$

产生随机数的可行点的程序段如下：

```
x2 = -9 + 13 * rand(1);
x1 = ((x2)^2 + 9) * rand(1);
x3 = 3 * (x1) + (x2) - 5 + (12 - (x1) * (x2) - 3 * (x1) - (x2)) * rand(1);
```

7.3.2 等式约束情形

当约束条件中出现等式约束时，将使自由变量的数量相应减少，有可能用一些变量来表示另一些变量，使得程序简化.

例 7.2 设某约束优化问题的约束条件为

$$\begin{aligned} \text{s.t.} \quad & 3x + y - 2z = 420, \\ & 9x - 4y + 22z = 1820, \\ & -5x - 2y^2 + w \leqslant -7, \\ & x \geqslant 0, y \geqslant 0, z \geqslant 0, w \geqslant 0. \end{aligned}$$

首先，将前两个等式联立，可解出

$$\begin{cases} x = (500 - 2z)/3, \\ y = 4z - 80. \end{cases}$$

因为 $$x \geqslant 0, \ y \geqslant 0,$$

所以 $500-2z\geqslant 0$，且 $4z-80\geqslant 0$，

则 $20\leqslant z\leqslant 250$.

于是，原问题的约束条件等价于

$$\text{s.t.}\quad \begin{aligned} &20\leqslant z\leqslant 250,\\ &x=(500-2z)/3,\\ &y=4z-80,\\ &0\leqslant w\leqslant 5x+2y^2-7. \end{aligned}$$

7.3.3 整数变量的情形

在第4章讨论了整数规划的解法．虽然整数规划的可行点的数量比去掉整数要求后所得的松弛问题的可行点的数量少得多，但是寻求整数优化的最优点的计算量却比解松弛问题大得多．然而，这种情形在采用蒙特卡罗优化方法时将不复存在，可以轻而易举地得到满足所有约束的随机整数点．由于当纯整数规划的可行域有界时，其可行点的数量有限，因而蒙特卡罗优化方法解纯整数规划将特别有效．

在 Matlab 语言中，floor(x)返回一个不大于 x 的最大整数，将取整函数与随机函数复合使用，就可产生所需要的随机整数．例如，

若 rand(1) = 0.0000001，则 100 × rand(1) = 0.00001，则

floor(100 * rand(1)) = 0

若 rand(1) = 0.999999999，则 100 × rand(1) = 99.99999，则

floor(100 * rand(1)) = 99

所以，复合函数 floor(100 * rand(1))将产生 0—99 共 100 个随机数．一般而言，设 M 是正整数，则复合函数 floor(M * rand(1)) 将产生 0—($M-1$)共 M 个整数．下面举例说明如何处理整数变量约束问题．

例 7.3 设某个整数规划的约束条件为

$$\text{s.t.}\quad \begin{aligned} &0\leqslant x\leqslant 600,\\ &200\leqslant y\leqslant 1100,\\ &x\leqslant z\leqslant y^2,\\ &x\geqslant 0,\ y\geqslant 0,\ z\geqslant 0,\\ &x,y,z\ \text{均为整数}. \end{aligned}$$

经分析可知，x 的取值为 $0,1,2,\cdots,600$ 共 601 个整数，y 的取值为 $200,201,202,\cdots,1100$，可表示为 $200+0$，$200+1$，$200+2,\cdots,200+900$，共 901 个整数，而定下 x 与 y 的值之后，如果满足 $y^2-x\geqslant 0$，则 z 的取值范围为 x，$x+1,\cdots,y^2$，共(y^2-x+1)个整数．据此，用蒙特卡罗方法解此整数规划的程序中，产生随机数的可行点的程序段如下：

```
x = floor(601 * rand(1))
y = 200 + floor(901 * rand(1))
if y^2 - x>0
    z = x + floor(rand(1) * (y^2 - x + 1))
end
x, y, z
```

以上所介绍的只是一些最基本的原则与方法，在处理实际问题的时候，应针对问题的

特殊性灵活应用. 另外, 作为一个实用的程序, 还应考虑如何处理意外情形(例如可行域是空集), 给出相应的信息.

7.4 非线性规划的优化解

蒙特卡罗方法具有许多显著的优点, 程序简单、计算量小, 还有可能获得全局最优点. 蒙特卡罗方法除了可以独立寻求最优解外, 往往还与其他算法相配合. 许多算法对初始点都有不同的要求, 一般而言, 初始点离极小点越近, 即初始点的函数值越好, 则算法越有效. 这时, 可以先使用蒙特卡罗方法找到较好的初始点, 然后改用其他优化方法. 另外, 有的算法(如可行方向法、内点法)对初始点的可行性有较高的要求, 当问题约束条件很复杂时, 很难凭人的直觉找到符合要求的点, 这时, 也可利用蒙特卡罗方法先期找到局部优化问题满足条件的初始解, 使优化寻解过程得以延伸.

例 7.4 求解非线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x)=3x_1^2-4x_2^2+5x_1x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1-x_2^2\leqslant 9, \\ & x_1x_2+x_3\leqslant 7, \\ & 3x_1+x_2-x_3\leqslant 5, \\ & -9\leqslant x_2\leqslant 4, \\ & x_1\geqslant 0. \end{aligned}$$

经过约束变换, 原问题化为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x)=3x_1^2-4x_2^2+5x_1x_3, \\ \text{s.t.} \quad & -9\leqslant x_2\leqslant 4, \\ & 0\leqslant x_1\leqslant x_2^2+9, \\ & 3x_1+x_2-5\leqslant x_3\leqslant 7-x_1x_2, \end{aligned}$$

利用 Matlab 编程实现为:

```
L=input('set an enough number L=')
M=input('set the number of dots M=')
for N=1: M
        x2=-9+13*rand(1);
        x1=((x2)^2+9)*rand(1);
        x3=3*(x1)+(x2)-5+(12-(x1)*(x2)-3*(x1)-(x2))*rand(1);
        if  12-(x1)*(x2)-3*x1-x2>=0
            f=3*(x1)^2-4*(x2)^2+5*(x1)*(x3);
            if  f<L
                L=f;
            end
        end
    end
L
```

运行程序，可以得到，当 $M=100000$ 时，$L=-375.9693$；当 $M=200000$ 时，$L=-377.9723$. 由此可见，运行结果也比较平稳.

可行域和目标函数的复杂性对蒙特卡罗方法不构成特别的障碍，并且随着随机数发生器和误差理论的不断完善，解的精确度问题也将得到解决.

习　题

1. 用蒙特卡罗法求解线性规划问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & 3x_1-2x_2+x_3,\\
\text{s.t.} \quad & 2x_1-3x_2+x_3=1,\\
& 2x_1+3x_2 \geqslant 8,\\
& x_1,\ x_2,\ x_3 \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

2. 用蒙特卡罗法求解整数规划问题

$$
\begin{aligned}
\max \quad & Z=65x_1+80x_2+30x_3,\\
\text{s.t.} \quad & 2x_1+3x_2+x_3 \leqslant 5,\\
& x_1,x_2,x_3 \geqslant 0,\\
& x_1,x_2,x_3 \text{ 是整数}.
\end{aligned}
$$

3. 用蒙特卡罗法求解非线性整数规划问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x)=x_1+x_1x_2+5x_2^2+3x_3^2,\\
\text{s.t.} \quad & x_1^2+2x_2^2+x_3^2 \leqslant 90,\\
& -1 \leqslant x_1 \leqslant 18,\\
& x_1,x_2,x_3 \text{ 是整数}.
\end{aligned}
$$

参考文献

1 Bazaraa M S, Shetty C M. Nonlinear Programming: Theory and Algorithms. Wiley, New York, 1979

2 Dantzig G B. Linear Programming and Extensions. Princeton University Press, Princeton, N.J, 1963

3 Fletcher R. Practical Methods of Optimization, Vol. 1, Unconstrained Optimization. John Wiley and Sons, Chichester, 1980

4 Fletcher R. Practical Methods of Optimization, Vol. 2, Constrained Optimization. John Wiley and Sons, Chichester, 1981

5 袁亚湘,孙文瑜.最优化理论与方法.北京:科学出版社,1997

6 陈宝林.最优化理论与算法.北京:清华大学出版社,1989

7 邓先礼.最优化技术.重庆:重庆大学出版社,1998

8 唐焕文,秦学志.最优化方法.大连:大连理工大学出版社,1994

9 高雷阜.Monte-Carlo理论与优化方法的研究.辽宁工程技术大学学报:自然科学版,2002,21(3):392—394

10 高雷阜.不确定规划模型及其算法研究.辽宁工程技术大学学报:自然科学版,2003

11 茨木俊秀,福岛雅夫.最优化方法.曾道智,译.北京:世界图书出版公司,1997

12 Luenberger D G.线性与非线性规划引论.夏尊铨,译.北京:科学出版社,1980

13 Avriel M.非线性规划—分析与方法.李元熹,等,译.上海:上海科学出版社,1979

14 杜薇.最优化计算方法.天津:天津大学出版社,1996

15 王日爽.泛函分析与最优化理论.北京:北京航空航天大学出版社,2003

16 赵静,但琦.数学建模与数学实验.北京:高等教育出版社,2000

17 Mount Holyoke College.数学实验室.白峰杉,等,译.北京:高等教育出版社,1998

18 萧树铁.数学实验.北京:高等教育出版社,1999